

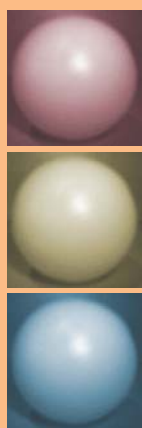
A TARTALOMBÓL:

Makromolekuláris építéset
funkciós polimerekkel

Originális és generikus
kémiai kutatás az Egisben

Kémiai közlemények – 2011

EuCheMS Newsletter,
2012. május



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVII. ÉVFOLYAM • 2012. MÁJUS • ÁRA: 850 FT

Jubileumi Szent-Györgyi- konferencia Szegeden



Egy teljesen más ICP-MS:
A Thermo Scientific iCAP Q

- Forradalmian új műszaki megoldások
- A legkiválóbb analitikai teljesítmény
- Kivételes robusztusság
- Rendkívül egyszerű kezelhetőség
- Kompakt méret



Thermo
SCIENTIFIC

Kizárólagos képviselő:

UNICAM Magyarország Kft., 1144 Budapest, Kőszeg u. 27.

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

E-mail: unicam@unicam.hu • Web: www.unicam.hu

UNICAM
Magyarország Kft.



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVII. évf., 5. szám, 2012. május



A Magyar Kémikusok Egyesületének
– a MTE SZ tagjának –
tudományos ismeretterjesztő
folyóirata és hivatalos lapja

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószervező: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE
Szerkesztők:
ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[SEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő,
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,
GÁL MIKLÓS, HANCSÓK JENŐ,
[HERMECZ ISTVÁN], JANÁKY CSABA,
JUHÁSZ JENŐNÉ, KALÁSZ HUBA,
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,
KÖRTVÉLYESI ZSOLT,
KÖRTVÉLYESSY GYULA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
RÁCZ LÁSZLÓ, SZABÓ ILONA,
SZEKENYI IMRE, TÖMPE PÉTER,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők

A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS

Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.

Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883,

fax: 36-1-201-8056

E-mail: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete

Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA

Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.

Nyomás és kötés: Mester Nyomda

Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT

Tel./fax: 36-1-455-5050

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete

Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank

1070024-24764207-51100005 sz.

számlájára „MKL” megjelöléssel

Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft

Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti

a Batthyany Kultur-Press Kft.,

H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.

1251 Budapest, Postafiók 30.

Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:

SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,

1015 Budapest, Hattyú u. 16. Tel.: 36-1-201-6883,

fax: 36-1-201-8056, e-mail: mkl@mke.org.hu

Aktuális számaink tartalma,

az összefoglalók és egyesületi híreink,

illetve archivált számaink honlapunkon

(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-1199 (online)

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja



Nemzeti
Kulturális
Alap



2012. május

Tudománnyal foglalkozó ember volnék. Egyetemi tanár a Szegei Tudományegyetemen. Ott, ahol március 22. és 25. között 9 Nobel-díjas tudós részvételével ünnepeltük a hazai tudomány egyik korábbi nagy sikerét, Szent-Györgyi Albert Nobel-díjának átadását. Alig egy héttel később (még szerencse, hogy nem egy időben az említett eseménnyel) tudományos értékét tekintve jóval kisebb, de az előbbinél jóval nagyobb hírértékű esemény történt. A Semmelweis Egyetem doktori tanácsa, majd szenátusa a tudományos munka presztízsét és becsületét megővő, példaértékű döntést hozott. Döntése meglepetést keltett a társadalomban, de különösen a politikai körökben, mert a fennálló hatalommal szemben foglalt állást. A döntés megszületésében – úgy tűnt – jelentős szerepet játszott már-már apolitikusnak kiköltött egyetemi fiatalágunk harcos kiállása is. Szimpátiám és elismerésem a Semmelweis Egyetem rektorának (remélem, a társegyetemek rektorai nem hagyják cserben akkor, amikor a hatalom ferde szemeket mereget rá elvszerű állásfoglalásáért) és közösségének; egy igaz ügy melletti kiállásuk követendő lehet. A politika viszont néhány napig régen látott mélységekben téblabolt, amíg megtalálta az egyetlen kivezető utat. Ismét sokat veszített az ország abból a megbecsülésből, amit eleink kivívtak a magyarságnak itt, Európa szívében. Mindönknek lesz tennivalója a jövőben.

Nézzük, miről is olvashatnak májusi számunkban. A nanorészecskék világába két cikkünk is elvezet. A funkciók polimerek széles körű alkalmazásába enged bepillantást Iván Béla és kollégáinak cikke. Deák Andrea az arany(I)-szupramolekulák előállításáról és szerkezetmeghatározásáról értekezik a Bruckner-termi előadások keretében. Náray-Szabó Gábor a tudományos közlés mai módszereit, szokásait és tendenciáit taglalja, míg a távoli Portugáliába szakadt hazánkfia, Székely György a tudományos írás etikai kérdéseiről mond magvas gondolatokat. Frissítő, könnyedebb olvasmány a középiskolai tanuló pályamunkája a 20. század elejének kissé elfeledett tudósnohőjének, Kelp Ilonának életéről és munkásságáról. Volk Balázs az Egis originális és generikus kémiai kutatásaira ad bepillantást, oda, ahonnan az idei innováció nagydíjas, vérrögképződés megelőzésére szolgáló Egitromb gyógyszer-molekula is kikerült. Az elektrokémia iránt mélyebben érdeklődők már biztosan olvasták Kiss László és Láng Győző e témakörben megjelent legújabb könyvét. Nagy Géza ismertetője a nem annyira szakmabeliek érdeklődését is szeretné felkelteni ezen értékes munka iránt. Kálmán Alajos írása a 100 éves Sasvári Kálmánt köszönti. Szakmai híreink a természettel egyetemben felpeszsdülő kémia világáról szólnak.

Lapunkban találunk egy véleménykérő mellékletet is. Amint ott megfogalmazzuk, kíváncsiak vagyunk olvasóink véleményére, lapunkkal kapcsolatos meglátásaira, hiányérzetére, javaslataira, hogy még olvashatóbb lapot juttassunk el olvasóink kezébe (nem asztalára) minden hónap elején. Ez évtől újra lehetőségünk lesz az Év legjobb cikkének jutalmazására, két kategóriában is, és erre várjuk olvasóink javaslatát. Erre is a mellékelt kérdőíven szavazhatnak. A kérdőíveket a honlapunkon is kitölthetik, és e-mailben vagy postán is eljuttathatják az Egyesületbe.

Kiss Tamás

Kiss Tamás

felelős szerkesztő

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

- Iván Béla, Fodor Csaba, Haraszi Márton, Kali Gergely, Kasza György, Mezey Péter, Osváth Zsófia, Pálfi Viktória, Pásztor Szabolcs, Soltész Amália, Szabó Ákos, Szabó Sándor, Szanka István, Szarka György, Verebelyi Klára: Makromolekuláris építészeti funkciók polimerekkel: szintézisük, reakcióik és alkalmazási lehetőségeik a nanovilágtól a katalízisen át a gyógyászatig **138**
- Volk Balázs: Originális és generikus kémiai kutatás az Egisben – szemelvények **140**
- Ötvös Sándor, Mándity István, Fülöp Ferenc: Organokatalízis folyamatos áramú reaktorban **143**

Bruckner-termi előadás

- Deák Andrea: Arany(I) tartalmú szupramolekulák szintézise és egykristály-röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározása **146**

KITEKINTÉS

- Náray-Szabó Gábor: Kémiai közlemények – 2011 **147**
- Székely György: Milyen magasan lobog ma a tudomány zászlaja? **150**

KÖNYVISMERTETÉS

- Nagy Géza: Új egyetemi tankönyv (Kiss László, Láng Győző: Elektrokémia) **152**
- EUCHEMS NEWSLETTER, 2012. MÁJUS **153**

KÖSZÖNTÉS

- Kálmán Alajos: Ritka jubileum: Sasvári Kálmán 100 éves! **157**

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

- Kucsman Árpád, Jalsovszky István: A kémia nem történelem. I. **160**
- Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata) **164**

OKTATÁS

- Új Eszter Dorottya: A „magyar Marie Curie”. Kelp Ilona életéről, munkásságáról **166**

VEGYÉSZLELETEK

- Lente Gábor rovata **168**

A HÓNAP HÍREI

170



Iván Béla*, Fodor Csaba, Haraszti Márton, Kali Gergely,
Kasza György, Mezey Péter, Osváth Zsófia, Pálfi Viktória,
Pásztor Szabolcs, Soltész Amália, Szabó Ákos, Szabó Sándor,
Szanka István, Szarka Györgyi, Verebélyi Klára

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet, Polimer Kémiai Osztály | *bi@chemres.hu

Makromolekuláris építészet funkciós polimerekkel: szintézisük, reakcióik és alkalmazási lehetőségeik a nanovilágtól a katalízisen át a gyógyászatig

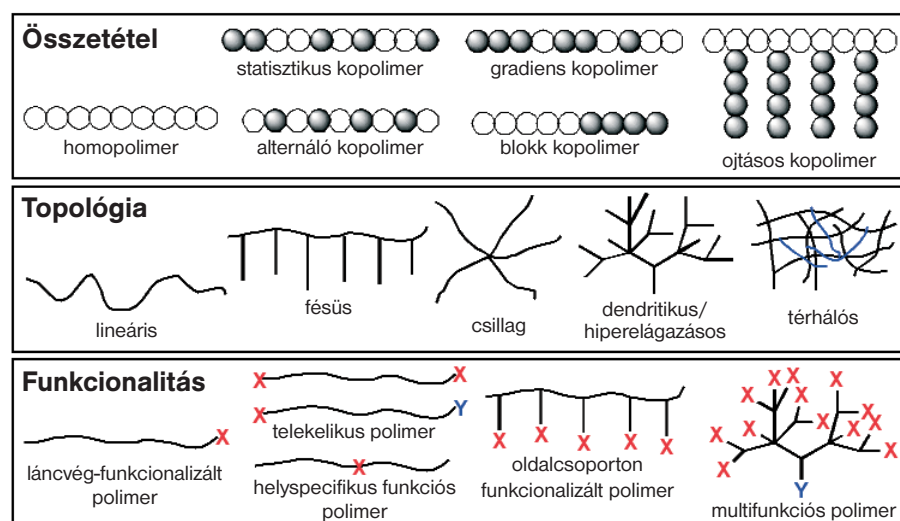
A polimer kémia napjainkban is zajló rohamos fejlődésének jelenleg egyik fő iránya a jól definiált szerkezettel rendelkező funkciós polimerek kutatásával kapcsolatos. Különösen jelentős figyelem irányul a terminális (láncvégi) funkciós csoportokkal rendelkező polimerekre, amelyekből – mintegy építőelemekként alkalmazva ezeket – teljesen újszerű makromolekuláris anyagok hozhatók létre. Az irodalomban ezt „makromolekuláris mérnökség” („macromolecular engineering”) [1,2] vagy „polimer építészet” („polymer architecture”) [3] elnevezéssel illetik. A polimerek kémiai és fizikai tulajdonságai szempontjából nemcsak a makromolekulák összetétele, azaz a monomer egységek kapcsolódási sorrendje, hanem a polimerek topológiája, valamint a funkciós csoportoknak a polimer láncban való elhelyezkedése is fontos szerkezeti tényező. [4] Ezeket csoportosítottuk az 1. ábrán. Megjegyzendő, hogy számos polimer esetében a sztereoregularitás, vagyis a cisz-transz izoméria és a takticitás is igen fontos sze-

repet játszik a polimerek tulajdonságainak a meghatározásában. Az itt bemutatott makromolekuláris szerkezetek közül kutatásaink főként a különböző topológiájú láncmenti és láncvégi funkciós polimerek-

re és azok további reakcióira, valamint felhasználási lehetőségeikre irányulnak.

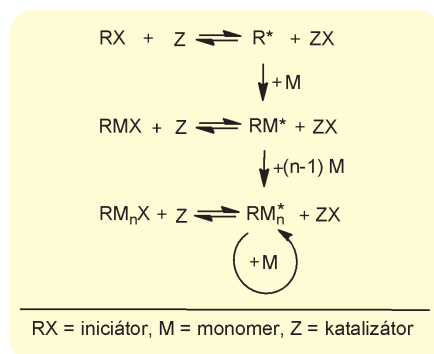
Nagy funkcionáltsági fokú, meghatározott átlag molekulatömegű és szűk molekulatömeg-eloszlású funkciós polimereket

1. ábra. A polimerek csoportosítása összetétel, térbeli felépítés és funkcionalitás szempontjából





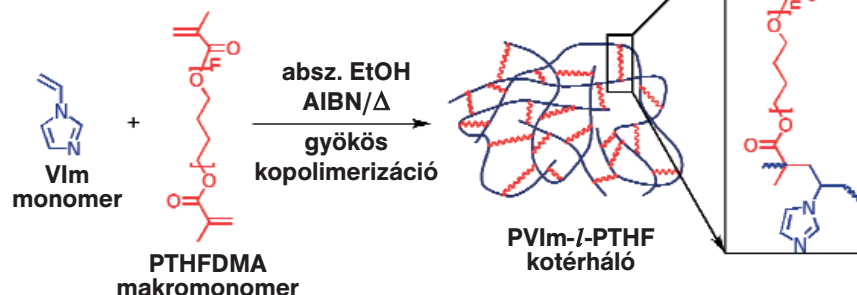
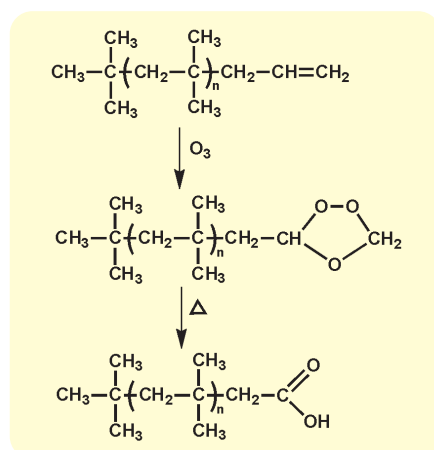
elsősorban kváziélő polimerizációval [5] lehet előállítani. A kváziélő polimerizáció általános reakciósémáját mutatja a **2. ábra**. Ezek olyan láncpolimerizációs reakciók, melyek láncnövekedésre képes (élő) és arra nem képes (nem élő) polimer láncok közötti egyensúlyi folyamatok révén zajlanak, és az egyensúlyi folyamat, valamint az elemi reakciók mechanizmusa lehetővé teszi a nemkívánatos mellékreakciók (irre-



2. ábra. A kváziélő láncpolimerizáció elemi folyamatai

verzibilis lánczáródás és láncátadás) elkezdését. Kváziélő karbokationos polimerizációval előállított, kettős kötésű végcsoporttal rendelkező poliizobutilén (PIB) [6] – amely biokompatibilis anyag – megfelelő körülmények között végrehajtott ozonolízisével karboxil-végcsoportú PIB előállítási eljárását dolgoztuk ki. [7,8] Az általunk alkalmazott, **3. ábrán** látható eljárás kielégíti a click-reakciókra megfogalmazott követelményeket [9], és további moduláris reakciókkal újabb funkciós csoportok kapcsolhatók a PIB láncok végére. [8] Karboxil-telekelikus (bifunkciós) PIB-et 2-hidroxietil-metakriláttal megfelelő körülmények között reagáltatva pedig metakrilát-telekelikus makromonomereket,

3. ábra. Karboxil végű poliizobutilén előállítása egy click-reakcióval, ozonolízissel



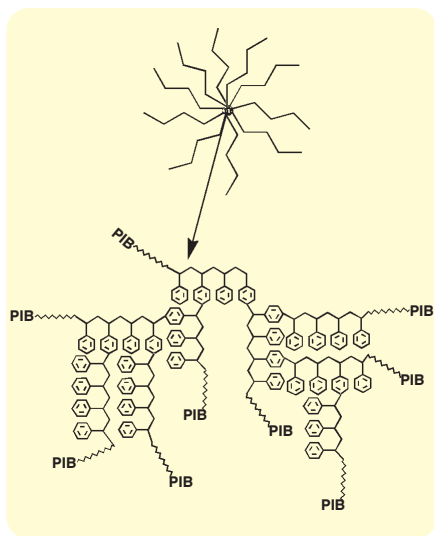
4. ábra. Amfifil kotérhálók képződése telekelikus makromonomer kopolimerizációjával: a poli(N-vinil-imidazol)-/l-politetrahidrofurán (PVIm-/-PTHF) kotérháló előállítása

azaz további polimerizációra képes makromolekulákat állítottunk elő. Az ilyen felépítésű makromonomerek különleges makromolekuláris építőelemeknek tekinthetők. Térhálósítóként alkalmazva ugyanis ezeket – egyszerű kopolimerizációs eljárásokkal – különféle, újszerű felépítésű kotérhálók alakíthatók ki. Különösen érdekesek ezek közül az úgynevezett amfifil kotérhálók [10], amelyek kovalens kötésekkel összekapcsolt, egyébként egymással nem elegyedő polimer láncokból épülnek fel. A poli(N-vinil-imidazol)-l-politetrahidrofurán [10g,h] példáján keresztül ezek általános szintézissémáját mutatja a **4. ábra** („l” a „linked by” rövidítése). A polimer kotérhálók szerkezeti, atomierő- (AFM) és transzmissziós elektronmikroszkópiás (TEM) [10a,b], kis szögű röntgenszórásos (SAXS), [10a-c] valamint szilárdtest NMR- [10c] vizsgálatával felderítettük, hogy ezek az anyagok különleges, úgynevezett kofolytonos, nanoméretű fázisokból álló morfológiával rendelkeznek, és a fázisok átlagos mérete a 3–50 nm tartományba esik [10a–c]. Kimutattuk, hogy a polimetakrilsav-l-poliizobutilén (PMAA-/-PIB) [10e] pH-függő duzzadási viselkedést mutató anyag, és ez a tulajdonsága például jól alkalmazható a közeg pH-ja által szabályozható intelligens hatóanyag-leadásra, pH-függő felületi tulajdonságokkal rendelkező anyagok létrehozására stb. A komponensek megfelelő megválasztásával létrehozhatók sókoncentrációra, a közeg összetételére, hőre, elektromágneses térre reverzibilisen választ adó kotérhálók is.

Az amfifil kotérhálók nanoméret-tartományba eső kofolytonos doménszerkezete teljesen új lehetőségeket kínál eddig nem létező, speciális nanohibridek létrehozására. Ezen új anyagok egyik fázisát ugyanis reaktánsokkal megtöltve nanoreaktorként viselkednek, vagyis a kémiai reakció csak a kiválasztott nanoméretű térrészben kö-

vetkezik be, míg a kotérháló másik összetevője a nanoreaktor falának szerepét tölti be. Ezt az elvet követve különféle, a nanofázis szerkezetű amfifil kotérhálókon alapuló szervesetlen-szerves nanohibrid anyagokat hoztunk így létre [10a,f], amelyek speciális optikai tulajdonságokkal vagy katalitikus aktivitással rendelkező nanorészecskéket, pl. sókat, oxidokat, nanofémeket stb. tartalmaznak. Kimutattuk azt is, hogy ezüstnanorészecskéket tartalmazó kotérhálók antibakteriális anyagokként viselkednek, azaz az ilyen anyagok többek között hosszú távú sterilítást igénylő gyógyászati területeken alkalmazhatók.

Kidolgoztuk nemcsak lineáris, hanem különféle elágazásos, terminális funkciós csoportokkal rendelkező polimerok előállításának eljárásait is. Ezen a területen folytatott kutatásaink során újszerű csillag- és hiperelágazásos polimerok szintézisét valósítottuk meg. [11] Így többek között létrehozottunk hiperelágazásos polimerokat nemcsak széles körben ismert monomerek, például sztírol és (met)akrilátok, hanem L-almasav és metakrilát végű polietilén-glikol (PEG) makromonomer irányított polimerizációjával is. Példaként az **5. ábrán** egy olyan csillag polimeret mutatunk be, amely kváziélő karbokationos polimerizációval előállított, láncvégi funkcionálissal rendelkező poliizobutilén-*b*-polisztirol blokk-kopolimer további reakciójával, Friedel–Crafts-önalkilezéssel kialakuló hiperelágazásos polisztirol maghoz kapcsolt poliizobutilén láncokból épül fel. [11b] Nagy érdeklődésre tart számot a kváziélő polimerizációs eljárások nyújtotta lehetőségek kiaknázása hiperelágazásos funkciós polimerok szintézise szempontjából is. Mono- és bifunkciós (vagy multifunkciós) monomerek kváziélő kopolimerizációjával a komponensek (iniciátor, monomer és elágazást eredményező bi- vagy multifunkciós monomerek) arányának megfelelő



5. ábra. Kvázielő karbokationos polimerizációval előállított csillag poliizobutilén hiperelágazásos polisztirol maggal

beállításával ugyanis elérhető, hogy ne következzen be gélesedés, azaz oldhatatlan polimer képződése. [11a] Ez a legkülönbözőbb funkciók csoportok kialakítására ad

lehetőséget. További lehetőségként adódik, hogy többféle funkció csoportot tartalmazó multifunkciós hiperelágazásos polimerek előállítását valósítsuk meg. A reaktív funkciók csoportokkal rendelkező hiperelágazásos polimereket máris több területen alkalmazzák, és egyre több, speciális, nagy hozzáadott értékű alkalmazásuk várható a közeljövőben.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetüket fejezik ki kutatásaik támogatásáért az OTKA-nak (K81592) és az MTA Kémiai Kutatóközpont Nanomedicina Programjának, valamint Dr. Medzihradszky-Schweiger Hedvignek az elemvizelések, Dr. Szesztay Andrásnének és Tyroler Endrénének a GPC, Szauer Juditnak a DSC, Dr. Domján Attilának az NMR, Dr. Németh Péternek a TEM, Dr. Ralf Thomannnak és Prof. Rolf Mülhauptnak az AFM, Bánfi Renátának az antibakteriális mérések, Podlávicski Blankának pedig a sémák készítése terén nyújtott segítségükért.

IRODALOM

- [1] J. P. Kennedy, B. Iván, *Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice*, Hanser Publishers, Munich, New York, 1992.

- [2] *Macromolecular Engineering: Precise Synthesis, Materials Properties*, Eds., K. Matyjaszewski, Y. Gnanou, L. Leibler, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
- [3] K. Müllen, M. Klapper, B. Iván, *Macromol. Chem. Phys.* (2007) 208, 1323.
- [4] K. Matyjaszewski, *Science* (2011) 333, 1104.
- [5] B. Iván, *Macromol. Chem. Phys.* (2000) 201, 2621.
- [6] B. Iván, J. P. Kennedy, *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* (1990) 28, 89.
- [7] A. Lange, H. Mach, H.-P. Rath, U. Karl, B. Iván, P. W. Groh, Zs. Nagy, V. Pálfi, *Verfahren von Carboxyl-terminierten Polyisobutenen*, DE Patent (2004) 10322164A1
- [8] V. Pálfi, B. Iván, *Polym. Mater. Sci. Eng.*, (2009), 101, 1630.
- [9] H. C. Kolb, M. G. Finn, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2001) 40, 2004.
- [10] (a) J. Scherble, R. Thomann, B. Iván, R. Mülhaupt, *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.* (2001) 39, 1429. (b) B. Iván, M. Haraszti, G. Erdődi, J. Scherble, R. Thomann, R. Mülhaupt: *Macromol. Symp.* (2005) 227, 265. (c) A. Domján, G. Erdődi, M. Wilhelm, M. Neidhöfer, K. Landfester, B. Iván, H. W. Spiess, *Macromolecules* (2003) 36, 9107. (d) G. Erdődi, B. Iván, *Chem. Mater.* (2004) 16, 959. (e) M. Haraszti, E. Tóth, B. Iván, *Chem. Mater.* (2006) 18, 4952. (f) P. Mezey, A. Domján, B. Iván, P. Németh, R. Thomann, R. Mülhaupt, *Polym. Mater. Sci. Eng.* (2010) 102, 500. (g) Cs. Fodor, G. Kali, B. Iván, *Macromolecules* (2011) 44, 4496. (h) Cs. Fodor, B. Iván, *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* (2011) 49, 4729.
- [11] (a) B. Iván, G. Erdődi, G. Kali, Gy. Kasza, I. Szanka, M. Szesztay, A. Soltész, *Polym. Prepr.* (2008) 49(1), 66. (b) G. Kali, M. Szesztay, A. Bodor, B. Iván, *Macromol. Chem. Phys.* (2007) 208, 1388.

Volk Balázs

Egis Gyógyszergyár Nyrt., Kémiai Kutatási Főosztály | volk.balazs@egis.hu

Originális és generikus kémiai kutatás az Egisben – szemelvények¹

Az alábbiakban a szerző válogatott fejezeteket mutat be az Egis Gyógyszergyár Nyrt. Kémiai Kutatási Főosztályának közelmúltbeli kutatásaiból. A kiválasztott témák sokfélesége azt hivatott bemutatni, mennyire különböző feladatok merülnek fel egy gyógyszergyár kutatási tevékenysége során. Bár ipari környezetben kevesebb időt lehet egy-egy jelentősebb kémiai felismerés vagy új reakció megvizsgálására szentelni, mint akadémiai-egyetemi kutatóhelyeken, mégis meg lehet, és – a szerző

meggyőződése szerint – meg is kell találni a lehetőséget arra, hogy tudományos szempontból is érdekes témák esetén az eredményeket gyógyszerügyi környezetben is publikáljuk, természetesen az ipari érdekek figyelembevételével.

Jelen közlemény röviden tárgyal egy, az oxindolok (indolin-2-on, 1,3-dihidro-2H-indol-2-on) 3-as helyzetű szelektív alkilezésére kidolgozott új eljárást, illetve egy kémiai alapjaiban ezzel a reakcióval szoros összefüggő originális kutatási téma, a piperazinilalkil-oxindol vázas szerotonin 5-HT₇ receptor-antagonisták kutatása kapcsán elért eredményeket. Ezt követi a meloxicam nem szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyag új gyártóeljárásának tárgyalása,

végül egy másik generikus gyógyszerhatóanyag, a desloratadine ipari előállítása, illetve a desloratadine karbaminsav-sójának jellemzése.

Oxindolok 3-as helyzetű szelektív alkilezése és ω-hidroxialkilezése

Mivel a szerző és munkatársai az oxindolok alkilezési reakcióiról e lap hasábjain a közelmúltban számoltak be [1], a téma részletes ismertetésétől itt eltekintünk. Az új eljárás (1. ábra) lényege, hogy izatinból, illetve katalitikus hidrogénezéssel szemben inert szubsztituenseket (F, alkil, MeO) hordozó, aromás gyűrűn helyettesített izatinokból (1) hidrogénatmoszférában (15 bar),

¹ A cikk a Zemlén Géza-díj átadásán, az MTA Felolvasótermében 2011. dec. 19-én megtartott előadás összefoglalása.



Raney-nikkel katalizátorral, autoklávban (140–220 °C, 2–6 h) primer és szekunder alkoholok széles körével reagáltatva egyedényes eljárásban, kitűnő hozamokkal előállíthatók a megfelelő 3-alkiloxindolok (2) [2]. Figyelemre méltó, hogy a Raney-nikkel mennyire különböző típusú reakciókat (dehidrogénezés, hidrogénezések, kondenzáció) képes katalizálni ebben a sok elemi lépésből álló [2] egyedényes eljárásban.

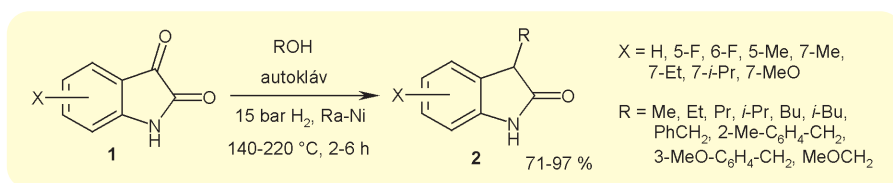
Alkoholok helyett α,ω -diolokkal is sikeresen valósítottuk meg a reakciót [2], ezáltal az első gyakorlati módszert közöltük a szintetikus kémiai szempontból igen értékes építőkövet jelentő 3-(ω -hidroxialkil)-oxindolok (3, 2. ábra) előállítására.

Piperazinilalkil-oxindol-vázás szerotonin 5-HT₇ receptor-antagonisták

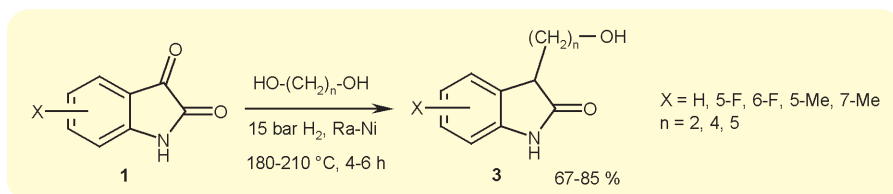
A különbözőképpen szubsztituált 3-alkil (2) és 3-(ω -hidroxialkil)oxindolok (3) variábilis és jó hozamú előállítását a fentiek szerint megoldva, a 3. ábra szerinti szintézisúton (illetve 3 kiindulási vegyületek esetén a terminális hidroxilcsoport metilezésével, majd 120 °C-on végzett ömledékes kapcsolási reakcióval) állítottuk elő a 4 típusú vegyületeket, receptorkötődési és viselkedésfarmakológiai vizsgálatok céljából [3,4].

A vegyületcsalád (4) szerkezetét a 4. ábra szerint helyeken módosítva mintegy 250 új vegyületet állítottunk elő, a nagyszámú vegyület megalapozott szerkezet-hatás összefüggések felállítását tette lehetővé.

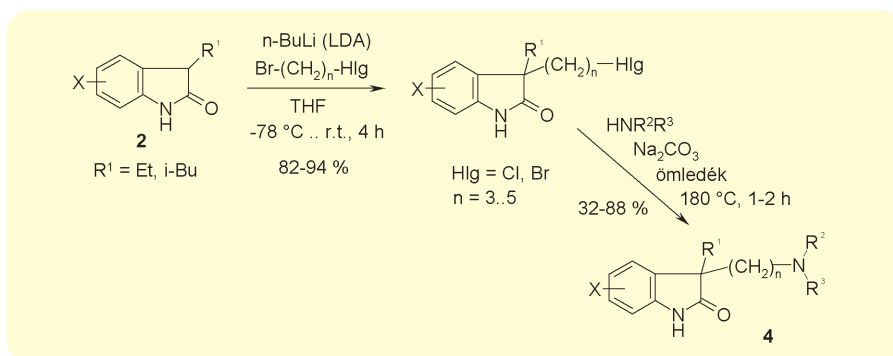
Vizsgálataink alapján a vegyületcsalád számos képviselője kiemelkedően erős affinitást ($K_i < 0.5$ nM is) mutat az 5-HT₇ receptorhoz, funkcionális teszt alapján az összes vizsgált vegyület antagonistaként viselkedett. Bizonyos származékok szelektívnek is bizonyultak más vizsgált receptorokkal szemben, illetve sikerült a metabolikus stabilitás kulcsát jelentő szerkezeti elemeket is felderíteni. A legjobb szár-



1. ábra. 3-Alkiloxindolok egyedényes előállítása izatinokból



2. ábra. 3-(ω -Hidroxialkil)oxindolok egyedényes előállítása izatinokból



3. ábra. Oxindolvázás 5-HT₇ receptorligandumok szintézise

mazékok több különböző *in vivo* szorongásgátló, illetve antidepresszáns teszten is szignifikáns hatást mutattak [3,4].

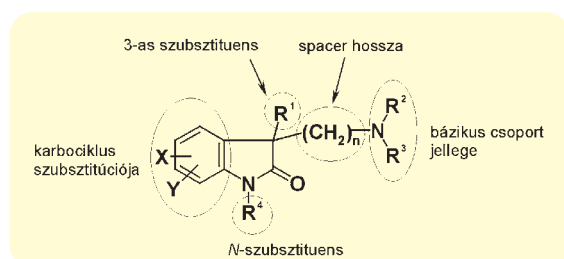
Nagy tisztaságú meloxicam hatóanyag előállítása

A meloxicam (5) nemzetközi szabadnevével nem szteroid gyulladáscsökkentő leghatékonyabb gyártó eljárása a 6 metil-észter intermediereken keresztül halad (5. ábra), mely 5-metiliazol-2-il-amminal (7) reagáltatva szolgáltatja a végterméket. A kondenzációs reakció erőlyes körülményei (pl. toluol reflux) között a kilépő metanol reakcióba lép az 5 termékkel, egy jelentős, több százalék mennyiségben keletkező

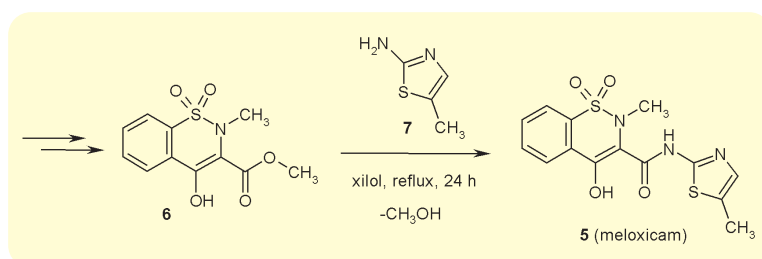
metilezett szennyezőt eredményezve. Az irodalomban leírt eljárások nem voltak alkalmasak arra, hogy elfogadható hozam mellett a szennyező mennyiségét az előírt szintre csökkentsék.

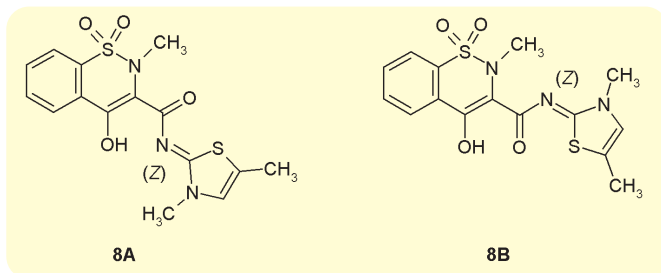
Az általunk kidolgozott új gyártóeljárás szerint a kondenzációs reakcióban kapott nyers 5 terméket 1 mol ekvivalens kálium-hidroxid vizes oldatával kezelve a termék (5) feloldódik, míg a metilezett szennyező kiszűrhető mellőle. A szűrlethez 5 ekvivalens kálium-hidroxidot adva szilárd, kristályos formában kiválik a meloxicam új sója, a káliumsó-monohidrát. Ezt a káliumsót savval kezelve gyakorlatilag 100%-os HPLC-tisztaságban nyerhető a meloxicam (5). A reakciót kísérleti üzemünkben

4. ábra. A vegyületcsalád szerkezeti módosítási lehetőségei

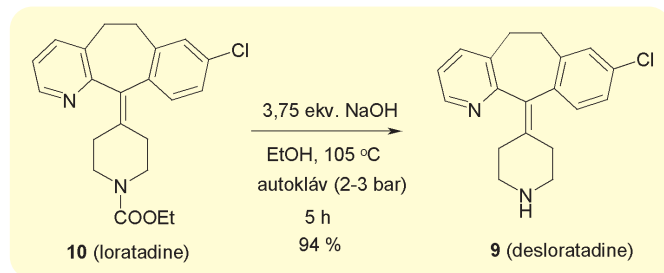


5. ábra. A meloxicam szintézise





6. ábra. A meloxicam metilezett szennyezőjének szerkezete



7. ábra. A desloratadine (9) optimalizált szintézise

20 kg-os sarzsmérettel is sikeresen elvégeztük, 6 vegyületre vonatkoztatva 79%-os összhozammal [5]. A káliumsó-monohidrát szerkezetét egykristály-röntgendiffrakto grammal igazoltuk.

Munkánk időpontjában a metilezett szennyező szerkezete nem volt ismert. NOE-mérés és MS-fragmentáció alapján igazoltuk, hogy a metilezés nem a savamid nitrogénatomon, hanem a tiazolgyűrű nitrogénjén játszódik le. Egykristály-röntgendiffrakciós méréseink szerint fény derült továbbá arra is, hogy a vegyület (Z) geometriájú kettős kötést tartalmaz és szilárd állapotban 8A rotamerként van jelen (6. ábra). Időközben, a 2009-ben megjelent európai gyógyszerkönyvi (Ph. Eur.) monográfiában is publikálták a metilezett szennyezés szerkezetét, az általunk kristályos formában mérttől eltérő 8B rotamerként. A vegyület szerkezetét igazoló adatok az irodalomból nem ismertek. Minthogy az ^1H NMR-spektrumban nem észleltük rotamer jelenlétét, feltételezhető, hogy a mérés körülményei között oldatban is a 8A rotamer van jelen [6].

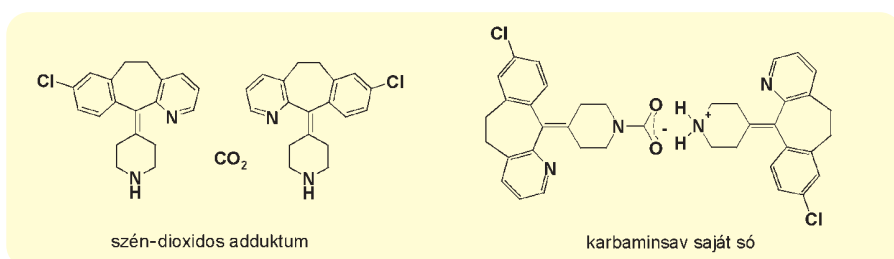
Desloratadine-karbaminsav-só

A desloratadine (9) hisztamin H_1 receptor-antagonista hatásmechanizmusú allergiaellenes szer, a Clarityn® márkanéven közismert loratadine (10) primer metabolitja és egyúttal utódmolekulája. A desloratadine (9) szintézise a loratadine-ból (10) kiindulva, az etoxikarbonil-csoport eltávolításával végezhető el. Az irodalmi eljárásokat tanulmányozva arra jutottunk, hogy az al-

kalmazott hosszú reakcióidők, a magas forráspontú, végtermékből nehezen eltávolítható oldószer, a 10-szeres vagy azt meghaladó bázisfeleslegek, illetve a termék nem kielégítő tisztasága miatt egyik sem kínálkozott alkalmas gyártó módszernek. Optimalizált eljárásunkban (7. ábra) a reakciót nyomás alatt (2–3 bar) végezzük, etanolban, 105 °C-on. Ezáltal a reakcióidő 5 órára rövidül, a NaOH-felesleg 4 ekv alá csökkenthető, és a kevésbé erőlyes körülményeknek köszönhetően kiemelkedően jó hozammal és nyersen is 99,9% feletti HPLC-tisztaságban állítható elő 9 vegyület [7]. Kísérleti üzemből 1,5 kg sarzsmérettel 96%-os hozammal végeztük el a reakciót.

Szabadalmi okokból a desloratadine (9) ismert polimorfjai helyett annak amorf formáját kívántuk előállítani és fejleszteni. Mivel az irodalomban [8] ismertek szórványos utalások arra, hogy kismolekulás aminok szén-dioxiddal képesek szilárd, jobbára rosszul definiált sztöchiometriájú adduktumokat képezni, megkíséreltük egy ilyen vegyület előállítását, amelyből aztán enyhe melegítéssel terveztük a szén-dioxidot eltávolítani, és amorf 9 vegyületet előállítani. Szén-dioxiddal telített etil-acetátba 9 etanolos oldatát csepegtetve fehér csapadék kiválását tapasztaltuk, amely szilárd fázisú vizsgálatok (IR, porröntgen) alapján nem volt azonos az ismert bázis-polimorfokkal. Elemanálízise és DTG-felvétel jól definiált és jól reprodukálódó desloratadine- $\text{CO}_2 = 2 : 1$ sztöchiometriát mutatott. Ez alapján a szén-dioxidos adduktum (8. ábra) szerkezetét feltételeztük [8].

8. ábra. A desloratadine szén-dioxiddal alkotott vegyületének lehetséges szerkezetei



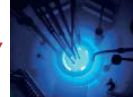
A későbbiekben további beható vizsgálatokat végeztünk a vegyülettel [9]. Szilárd fázisú ^{13}C NMR-felvételt készítettünk mind a bázisból, mind a szén-dioxidos molekula vegyületből, továbbá részletes oldatfázisú ^1H és ^{13}C NMR-méréseket is végeztünk, különböző hőmérsékleteken, illetve oly módon is, hogy a 9 bázis szén-dioxiddal telített oldószerben oldottuk fel és vizsgáltuk a spektrumok időbeli változását. Ezen részletesebb vizsgálatok alapján a 8. ábrán feltüntetett karbaminsav saját só típusú szerkezetet valószínűsítjük. A karbaminsav-só képzés specifikus, a desloratadine szennyezői nem adják, így a só, illetve kívánt esetben a belőle visszanyert 9 bázis tisztasága a 99,97%-ot is meghaladja. Az irodalomban nem ismertek bázikus gyógyszerhatóanyagok hasonló származékai. ●●●

KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS

A szerző köszönetet mond Simig Gyulának a cikk összes témájában nyújtott segítségéért, továbbá Mezei Tibornak, Király Imrének és Molnár Enikőnek a preparatív kémiai munkáért és ötletekért, Bakó Tibornak, Kapillerné Dezsőfi Ritának, Peltz Csabának és Dancsó Andrásnak a szerkezetfelfedezési-analitikai közreműködésért, valamint Szénási Gábornak és Gacsályi Istvánnak a farmakológiai mérésekért és konzultációkért.

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Volk B., Porcs-Makkay M., Simig Gy., Magy. Kém. Lapja (2012) 5.
- [2] B. Volk, Gy., Simig Eur. J. Org. Chem. (2003) 3991.
- [3] B. Volk, J. Barkóczy, E. Hegedűs, Sz. Udvari, I. Gacsályi, T. Mezei, K. Pallagi, H. Kompagne, Gy. Lévy, A. Egyed, L. G. Hársing Jr., M. Spedding, Gy. Simig, J. Med. Chem. (2008) 51, 2522.
- [4] B. Volk, I. Gacsályi, K. Pallagi, L. Poszavác, I. Gyönös, É. Szabó, T. Bakó, M. Spedding, Gy. Simig, G. Szénási, J. Med. Chem. (2011) 54, 6657.
- [5] T. Mezei, N. Mesterházy, T. Bakó, M. Porcs-Makkay, Gy. Simig, B. Volk, Org. Proc. Res. Dev. (2009) 13, 567.
- [6] B. Volk, A. Dancsó, T. Bakó, Cs. Peltz, Gy. Simig, Org. Proc. Res. Dev. (2011) 15, 339.
- [7] T. Mezei, Gy. Simig, Gy. Lukács, M. Porcs-Makkay, B. Volk, E. Molnár, V. Hoffmann-Fekete, Zs. Szent-Királyi, WO 2006003479, 2006.
- [8] T. Mezei, B. Volk, I. Király, Gy. Simig, Org. Proc. Res. Dev. (2008) 12, 855.
- [9] Király Imre PhD-értékeztése, BME Vegyészmérnöki Kar, 2011.



Ötvös Sándor–Mándity István–Fülöp Ferenc

SZTE Gyógyszerkémiai Intézet

Organokatalízis folyamatos áramú reaktorban¹

Az áramlásos technológiákat már régóta alkalmazza az olajipar, az utóbbi években viszont a szerves szintetikus kémiában is elkezdtek meghonosodni, köszönhetően annak, hogy a hagyományos szakaszos eljárásokhoz képest számos előnnyel rendelkeznek, ezek közül a legfontosabbak: a reagensek gyors és hatékony keveredése, hatékonny hűtőadás és rövid reakcióidők [1, 2]. A modern áramlásos berendezések nagyon kis anyagmennyiségeket is tudnak kezelni (mikroreaktorok), továbbá a legfontosabb reakcióparaméterek (áramlási sebesség, nyomás és hőmérséklet) pontosan szabályozhatók, így az optimális reakciókörülmények gyorsan és könnyedén beállíthatók [3]. Nemcsak homogén fázisú reakciók kivitelezhetők folyamatos áramban, az olajiparhoz hasonlóan állóágas reaktorok is elterjedtek, amelyekben tetszőleges immobilizált reagensek, katalizátorok helyezhetők el, sőt egyes reaktortípusok gáz halmazállapotú reagensek kezelésére is alkalmasak, akár szuperkritikus körülmények között is [4–6]. Mivel a technológiai alapok a nagyiparban gyökereznek, a méretnövelési és automatizálási lehetőségek is adóztak, így a laboratóriumi kísérletek köréből kilépve a gyógyszeripar számára is vonzóvá tehető a technika.

Az organokatalízis olyan újszerű megközelítés a szerves kémiában, amely fématomokat nem tartalmazó szerves molekulákat alkalmaz katalizátorként. E tudományterület virágzása az ezredforduló környékén indult, egy egyszerű aminosav, a prolin mint organokatalizátor elterjedésével. A prolin a C–C kötések kialakítására szolgáló népszerű Michael-, Mannich- és aldolreakciók katalizátorává vált, jó hozam- és szelektivitásértékek elérése mellett [7]. Mivel a szintézismódszerek hatékonyságának növelése iránt folyamatosan nőtt az igény, a prolin módosításával számos aktívabb és/vagy szelektívebb organokatalizátort fejlesztettek ki [8, 9]. Nem nehéz belátni azonban, hogy a kisméretű, prolin-szerű katalizátorok továbbfejlesztése, módosítása egy adott szint elérése után korlátozott a funkciócsoportok limitált szá-

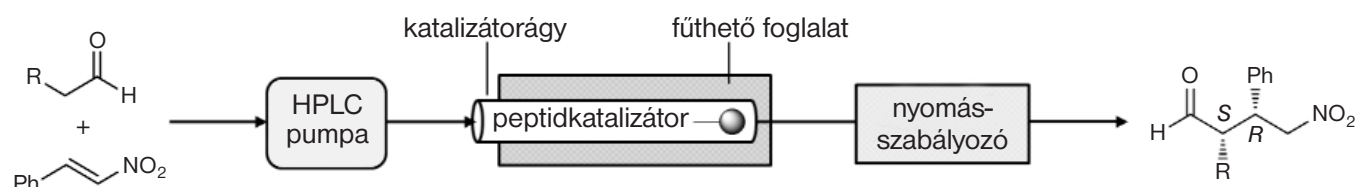
ma miatt. Ugyanakkor ha olyan moduláris felépítésű molekulákat alkalmazunk katalizátorként, mint a peptidok, akkor az előző akadályon könnyedén túllépve, az építőelemek változtatásával (finomhangolás) kedvező tulajdonságokkal rendelkező katalizátorokat állíthatunk elő. A peptidok mellett szóló érv az is, hogy kiralitás információtartalmuk nem merül ki az aminosavak aszimmetriájában, hanem másodlagos és harmadlagos szerkezetükből is jelentős kiralitás indukció adódhat. Az utóbbi években számos peptid, illetve peptidszerű organokatalizátort fejlesztettek ki, és megszületett a felismerés, miszerint egyes peptidok a prolin katalitikus tulajdonságait imitálják, sőt túl is mutatnak azon [10].

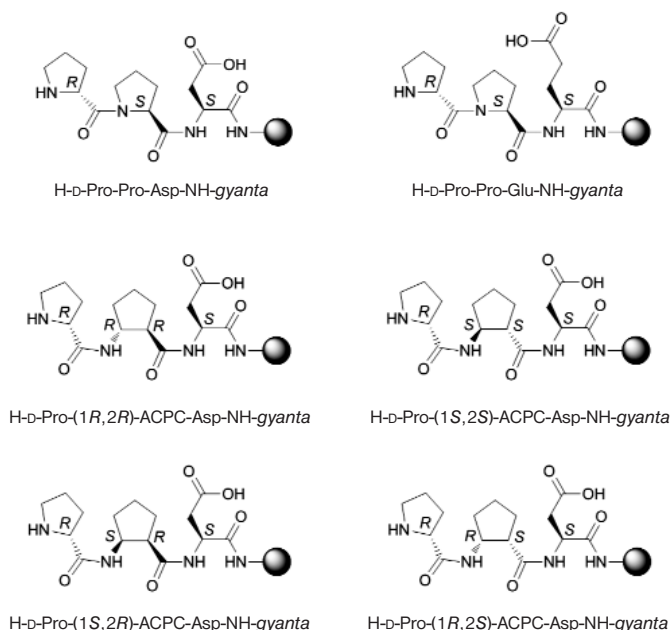
Munkánk során kidolgoztuk az első organokatalitikus áramlásos módszert aldehidek nitroolefinekre történő konjugált addíciójához, szilárd hordozós peptidkatalizátor alkalmazásával [6]. Választásunk azért esett a peptidokra, mert szilárd fázisú peptidszintézis alkalmazásával a katalizátor szintézise és immobilizációja egy lépésben megvalósítható. Az Fmoc/*t*Bu protokoll szerint történő peptidszintézishez olyan speciális gyantákat kerestünk hordozóként, amelyekről a védőcsoport-eltávolítási lépések során nem hasad le a katalizátor. Végül két hordozóra esett a választásunk: (i) politelinglikol–polisztirol kopolimer TentaGel-re és (ii) 4-metilbenzidrilamin linkerrel rendelkező térhálósított polisztirol gyantára (MBHA). Ez a kísérleti elrendezés meglehetősen egyszerű és praktikus, ugyanis megspórolható az idő- és energiaigényes peptidtisztítási és feldolgozási lépések, az immobilizált katalizátort pedig rozsdamentes acél oszlopokba töltve közvetlenül felhasználhattuk a peptidszintézis után. A folyamatos áramú reakciókat egy H-Cube[®] készülék segítségével hajtottuk végre „no H₂” üzemmódban. A katalizátort tartalmazó rozsdamentes acél oszlop (katalizátorágy) egy fűthető foglalatba került, a reagensek folyamatos áramát ezen keresztül egy HPLC pumpa biztosította. A berendezés egy nyomáscsökkentő egységet is tartalmazott. A kísérleti elrendezés vázlatát az **1. ábrán** szemléltetjük [11].

Kiindulásként, a folyamatos áramú módszer finomhangolásához irodalmi megfontolások alapján az alábbi peptidkatalizátort választottuk: H-D-Pro-Pro-Asp-NH₂ (Pro = prolin, Asp = aszpara-

¹ A cikk Ötvös Sándor PhD-hallgatónak a 2011-es Szegedi Ifjú Szerves Kémikusok Támogatásáért Alapítvány tudományos előadóiülésén elhangzott, első helyezett előadása alapján készült.

1. ábra. A folyamatos áramú berendezés vázlatja

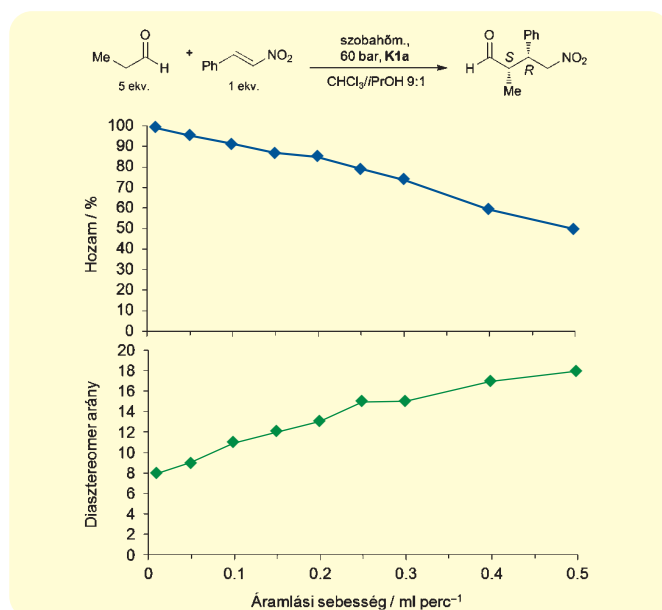




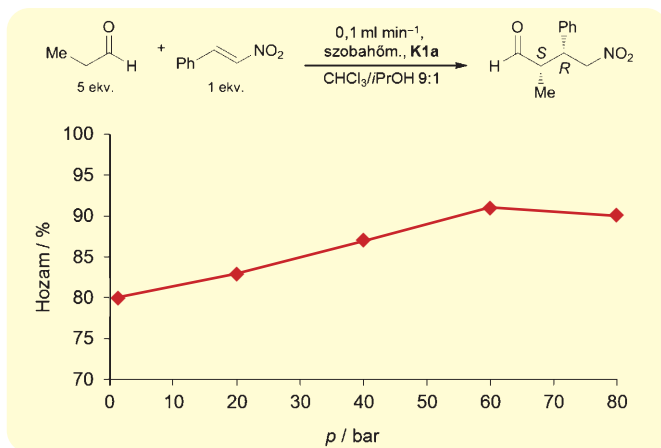
2. ábra. Szilárd hordozós peptidkatalizátorok

ginsav) [12]. E tripeptid prolinmimetikumnak tekinthető, ugyanis szekunder amin- és karboxil-funkciót tartalmaz speciális orientációban (2. ábra). A katalitikus aktivitásért az említett funkciók csoportok, a szelektivitásért pedig elsősorban a peptid másodlagos szerkezete felelős. A peptidet kezdetben 0,64 mmol · g⁻¹ töltöttségű MBHA gyantán immobilizáltuk (K1a). Az oldószer körülmények kiválasztása fontos volt, ugyanis figyelembe kellett vennünk a reagens oldhatósága mellett a porózus szerkezetű hordozó duzzadási tulajdonságait is. Mivel alapvetően mind a kétféle gyanta apoláros oldószerekben duzzad jól, viszont a kiindulási anyagok inkább poláros oldószerekben oldhatók, egy oldószerkeverégre, a CHCl₃/iPrOH 9:1-re esett a választásunk. A reakcióparaméterek optimalizálásához a propionaldehid *E*-β-nitrosztírolra (BNS) történő konjugált addícióját választottuk tesztre-

3. ábra. Az áramlási sebesség finomhangolása a propionaldehid BNS-re történő folyamatos áramú konjugált addíciója során



akcióként, a BNS koncentrációját 8 mg · ml⁻¹ konstans értéken tartva. A továbbiakban az alábbi reakcióparaméterek változtatásának hatását vizsgáltuk: áramlási sebesség, reagensfelesleg, nyomás és hőmérséklet. A célunk az volt, hogy a módszert a lehető leghatékonyabbá tegyük, azaz a minimális reakcióidőt érjünk el minimális reagensfelesleg alkalmazásával, magas hozam és szelektivitásértékek elérése mellett. Egy áramlásos eljárás esetében a reakcióidőt a reagens reaktorban töltött tartózkodási ideje jelenti (esetünkben a „reaktor” alatt csak a töltetes oszlopot értjük). Minél nagyobb az áramlási sebesség, annál kisebb a tartózkodási idő és annál nagyobb az eljárás kapacitása, viszont a túl nagy áramlási sebesség (azaz túl rövid reakcióidő) a konverzió rovására mehet. Ezt jól példázza, hogy 60 bar nyomáson, szobahőmérsékleten, 5 ekv aldehidfelesleggel 0,01 ml · perc⁻¹ áramlási sebesség mellett közel teljes hozamot értünk el, viszont az áramlást 0,5 ml·perc⁻¹-re növelve a termelés a felére esett vissza (3. ábra). Érdekes ugyanakkor azt is mérlegelni, hogy az előbbi esetben 5 ml reakcióelegyet több mint 8 órába tartott átpumpálni a reaktoron, viszont 0,5 ml · perc⁻¹ áramláson ugyanez 10 percbe telt. Ezért kompromisszumként 0,1 ml · perc⁻¹ áramlási sebességet választottunk optimálisnak, amelyen 91%-os termelés adódott. Az áramlási sebesség változtatása nemcsak a termelésre van hatással, hanem a diasztereómer arányra (*dr*) is: minél kisebb az áramlási sebesség, annál alacsonyabb a *dr* (3. ábra). Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy maga a katalizátor kiválthatja a termék epimerizációját. Hogy ezt bebizonyítsuk, a termékként kapott γ-nitroaldehid oldatát újra átpumpáltuk a katalizátorágyon 0,1 ml · perc⁻¹ áramlási sebességgel, és azt tapasztaltuk, hogy ekkor a *dr* 11:1-ről 4:1-re romlik. Ha azonban a peptid N-terminális D-prolinját először acetilcsoporttal védjük, és csak utána pumpáltuk át rajta a γ-nitroaldehid terméket, nem változott a *dr*. Ez a megfigyelés megerősítette, hogy a lehető legkisebb tartózkodási időt célszerű választani a katalizátorágyon. Az aldehid nagy feleslege a reakciót ugyan a termékképződés irányába mozdíthatja, viszont a túl nagy reagensfelesleg a módszer hatékonyságát csökkenti. 60 bar nyomáson, szobahőmérsékleten, 0,1 ml · perc⁻¹ áramlás mellett 15 ekv propionaldehid-felesleg közel teljes hozamot eredményezett, azonban az optimális értéket 5 ekv-ben maximáltuk. Ezután megvizsgáltuk a nyomás növelésének hatását is (szobahőmérsékleten, 0,1 ml · perc⁻¹ áramlási sebesség mellett). Azt tapasztaltuk, hogy atmoszférakusról 60 barra növelve a nyomást a termelés 80-ról 91%-ra nő, további emelés azonban hatástalannak bizonyult (4. ábra). Felvetődik a kérdés, hogy a reakciót a katalizátor aktivitása mellett a reagens katalizátorhordozó mátrixán belül történő transzportja korlátozhatja-e. Hogy kijelenthessük: a reakció az általunk megadott körülmények között diffúziókontrollált, elvégeztük a Körös-Nowák-tesztet [13]. Ehhez az amin-végződések acetilezésével az MBHA gyanta töltöttségét megfeleztük, majd az így kapott 0,32 mmol · g⁻¹ kapacitású gyantán immobilizáltuk a D-Pro-Pro-Asp-NH₂ peptidet (K1b). A tesztreakciót megismételve K1b-vel 78%-os termelést kaptunk, míg ugyan ilyen körülmények között K1a-val 91%-ot sikerült elérni. Mivel a termelés csökkenése nem arányos a katalizátortölttség csökkenésével, kijelenthető, hogy a reakció az általunk szabott feltételek mellett diffúziókontrollált, és a magas nyomás a reagens transzportját hivatott elősegíteni a katalizátorhordozó duzzadt mátrixán belül. A hőmérséklet változtatásának hatásait vizsgálva arra a következtetésre jutottunk, hogy nem érdemes szobahőmérséklet fölé növelni a reaktor hőmérsékletét, mert a termelés növekedése mellett drasztikus mértékben csökken a sztereoselektivitás.



4. ábra. A nyomásnövelés hatásának vizsgálata a propionaldehid BNS-re történő folyamatos áramú konjugált addíciója során

Az áramlások reakció főbb paramétereinek optimalizálása után a peptidkatalizátor szerkezeti finomhangolását is elvégeztük. Vizsgáltuk a C-terminális aszparginsav cseréjének hatását a vele homológ glutaminsavra (Glu). A H-D-Pro-Pro-Glu-NH₂ peptidszekvenciát 0,32 és 0,64 mmol · g⁻¹ kapacitású MBHA gyantán is immobilizáltuk (K2a és K2b). A propionaldehid és BNS tesztreakcióját az optimális körülményeken megismételve azt tapasztaltuk, hogy a glutaminsavat tartalmazó katalizátorok ugyan K1a-val és K1b-vel összemérhető sztereoselektivitást nyújtanak, viszont katalitikus aktivitásuk kisebb, ugyanis alacsonyabb termeléseket értünk el velük (1. táblázat). Ezután izoszter-helyettesítéseket hajtottunk végre a katalizátor középső prolinrészeének β-aminosavakra történő cseréjével, majd vizsgáltuk a peptidkonformáció változásának katalitikus aktivitásra gyakorolt hatásait [14]. Azt tapasztaltuk, hogy (1R,2R)-2-aminociklopentánkarbonsavra (ACPC) történő csere (K3) gyakorlatilag K1a-val összemérhető eredményeket ad, azonban az (1S,2S)- (K4), (1S,2R)- (K5) és (1R,2S)-ACPC (K6) izomerekkel történő helyettesítés esetén a katalizátor aktivitása és/vagy szelektivitása jelentősen csökken (1. táblázat). Ezek az eredmények azt bizonyítják, hogy hatékony katalízishez a katalizátor aktív csoportjainak (szek-amin és karbo-

1. táblázat. Az immobilizált peptidkatalizátor finomhangolása a propionaldehid BNS-re történő folyamatos áramú konjugált addíciója során

Immobilizált katalizátor	Gyanta-töltöttség/ mmol · g ⁻¹	Termelés/ %	dr	ee/ %
K1a: H-D-Pro-Pro-Asp-NH-MBHA	0,64	91	11:1	93
K1b: H-D-Pro-Pro-Asp-NH-MBHA	0,32	78	11:1	92
K2a: H-D-Pro-Pro-Glu-NH-MBHA	0,64	79	12:1	91
K2b: H-D-Pro-Pro-Glu-NH-MBHA	0,32	69	11:1	91
K3: H-D-Pro-(1R,2R)-ACPC-Asp-NH-MBHA	0,64	83	10:1	90
K4: H-D-Pro-(1S,2S)-ACPC-Asp-NH-MBHA	0,64	41	15:1	93
K5: H-D-Pro-(1S,2R)-ACPC-Asp-NH-MBHA	0,64	70	9:1	70
K6: H-D-Pro-(1R,2S)-ACPC-Asp-NH-MBHA	0,64	35	19:1	89
K7: H-D-Pro-Pro-Asp-NH-TentaGel	0,27	81	11:1	92
K8: H-D-Pro-Pro-Glu-NH-TentaGel	0,27	73	12:1	91

xil) megfelelő orientációja, és ezt biztosító peptidkonformáció szükséges. A D-Pro-Pro-Asp-NH₂ és D-Pro-Pro-Glu-NH₂ peptidszekvenciákat 0,27 mmol · g⁻¹ töltöttségű TentaGel gyantához kötve is előállítottuk (K7 és K8). Mivel a TentaGel gyanta duzzadási tulajdonságai valamivel kedvezőtlenebbek, sőt a töltöttsége is alacsonyabb, nem meglepő, hogy az MBHA hordozóhoz képest alacsonyabb termeléseket sikerült elérnünk (1. táblázat). Az előállított peptidkatalizátorokat a 2. ábrán szemlétetjük.

Az optimális reakciókörülményeket az alábbiakban foglalhatjuk össze: 0,1 ml · perc⁻¹ áramlási sebesség, 5 ekv aldehidfelesleg, 60 bar nyomás, szobahőmérséklet, K1a katalizátor. Ezeket a paramétereket alkalmazva a tesztreakció eredményeül (2S,3R)-2-metil-4-nitro-3-fenilbutanal 91%-os termelés, 11 : 1 dr és 93% ee

R	Módszer	Reakcióidő	Termelés/%	dr	ee/%
Me	áramlás batch ref.	7 perc 24 óra	91 98	11:1 9:1	93 91
Et	áramlás batch ref.	7 perc 12 óra	60 93	22:1 25:1	91 95
nPr	áramlás batch ref.	7 perc 12 óra	68 94	15:1 15:1	91 92
nBu	áramlás batch ref.	7 perc 12 óra	87 99	14:1 15:1	91 92
Bn	áramlás batch ref.	7 perc 12 óra	65 89	36:1 15:1	92 95
iPr	áramlás batch ref.	7 perc 24 óra	22 88	20:1 50:1	91 92

2. táblázat. A kidolgozott folyamatos áramú módszer felhasználhatóságának kiterjesztése és az eredmények összehasonlítása irodalmi batch referenciával [12]

elérésével sikerült előállítanunk. Ezek az eredmények jó egyezést mutatnak azokkal az irodalmi értékekkel, amelyeket hagyományosan lombikban kevertetve hordozómentes H-D-Pro-Pro-Asp-NH₂ peptid katalizátor alkalmazásával értek el (2. táblázat) [12]. Fontos azonban hangsúlyozni, hogy esetünkben a katalizátorágyon töltött tartózkodási idő, ami a reakcióidőnek felel meg, mindössze 7 perc volt, ezzel szemben a hagyományos szakaszos eljárás alkalmazásával 24 óra szükséges. A reakcióidő ilyen drasztikus csökkenése az alkalmazott módszer előnyös tulajdonságainak köszönhető: (i) áramlások kémia, (ii) nagy nyomás és (iii) magas lokális katalizátorkoncentráció.

Tanulmányoztuk az immobilizált katalizátor újrahaználhatóságát is. Ezért az optimális körülményeken a tesztreakciót egymás után többször végrehajtottuk ugyanazon a katalizátortölteten. Minden egyes reakció során 5 ml kiindulási elegyet pumpáltunk át a reaktoron 50 perc alatt. Az első öt reakció után a termelés 80% fölött maradt, és a 10. újrahaználás után is még 70% körül értékek adódtak (3. táblázat). A kísérletsorozat során az ee gyakorlatilag nem változott, azonban a dr nőtt. Ez azzal magyarázható, hogy a D-prolin szek-amin-csoportja a katalizátor aktív részét képezi, ugyanakkor a termék epimerizációját is okozhatja. A katalizátor kimerülésével blokkolódna ezek a funkciók, azaz csökken az aktivitás, viszont epimerizáció sem történik.



Felhasználás	Termelés/%	dr	ee/%
1.	91	11:1	93
2.	86	12:1	93
3.	84	12:1	94
4.	83	12:1	93
5.	82	13:1	93
6.	76	15:1	93
7.	74	15:1	93
8.	72	16:1	93
9.	67	15:1	94
10.	66	15:1	94

3. táblázat. Az immobilizált organokatalizátor újrahazsnálhatóságának vizsgálata

A kidolgozott módszer alkalmazhatóságát kiterjesztettük számos további aldehid és BNS konjugált addíciójára. A reakciókat a korábban optimalizált körülmények között hajtottuk végre, **K1a** alkalmazásával. Elágazást nem tartalmazó aldehidek nagyon jó reakciópartnernek bizonyultak, ugyanis a megfelelő γ -nitroaldehid termékeket magas hozam (60–91%), *dr* (11 : 1–36 : 1) és *ee* (91–93%) elérésével állítottuk elő (2. táblázat). A β -elágazást tartalmazó izovaleraldehid esetében alacsonyabb termelést kaptunk, viszont a sztereoselektivitás magas volt. A 2. táblázatban saját eredményeink mellett hagyományos batch referenciák is találha-

tók [12]. Jól látható, hogy az általunk folyamatos áramban elért sztereoselektivitások jó egyezésben vannak az irodalmi értékekkel, bár a termelések rendszerint valamivel alacsonyabbak. Azonban azt is figyelembe kell venni, hogy az általunk kidolgozott módszer nagyon gyors, reakcióideje mindössze 7 perc, viszont a hagyományos eljárás lassú, 12–24 órás kevertetést igényel.

Munkánkat röviden összefoglalva elmondható, hogy kidolgoztuk az első folyamatos áramú módszert organokatalitikus 1,4-addíciós reakciókhoz. Katalizátorként szilárd hordozóhoz kötött peptidet alkalmaztunk, amelynek szintézise és immobilizációja praktikusán egy lépésben történt. A módszer célszerűségét fokozza, hogy a reakcióidőt sikerült jelentősen csökkentenünk a hagyományos szakaszos eljáráshoz képest, továbbá, hogy az immobilizált katalizátor újrahasználatos.

IRODALOM

- [1] C. Wiles and P. Watts, *Green Chem.* (2012) 14, 38.
- [2] Wegner, S. Ceylan, A. Kirschning, *Chem. Commun.* (2011) 47, 4583.
- [3] J.-i. Yoshida, H. Kim and A. Nagaki, *ChemSusChem* (2011) 4, 331.
- [4] I. M. Mándity, T. A. Martinek, F. Darvas, F. Fülöp, *Tetrahedron Lett.* (2009) 50, 4372.
- [5] S. B. Ötvös, I. M. Mándity, F. Fülöp, *Mol. Divers.* (2011) 15, 605.
- [6] S. B. Ötvös, I. M. Mándity, F. Fülöp, *ChemSusChem* (2012) 5, 266.
- [7] P. I. Dalko, L. Moisan, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2004) 43, 5138.
- [8] S. Bertelsen, K. A. Jorgensen, *Chem. Soc. Rev.* (2009) 38, 2178.
- [9] P. Melchiorre, M. Marigo, A. Carlone, G. Bartoli, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2008) 47, 6138.
- [10] E. A. C. Davie, S. M. Mennen, Y. J. Xu, S. J. Miller, *Chem. Rev.* (2007) 107, 5759.
- [11] R. V. Jones, L. Gödörházy, N. Varga, D. Szalay, L. Ürgé, F. Darvas, *J. Comb. Chem.* (2006) 8, 110.
- [12] M. Wiesner, J. D. Revell, H. Wennemers, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2008) 47, 1871.
- [13] R. M. Körös, E. J. Nowák, *Chem. Eng. Sci.* (1967) 22, 470.
- [14] A. Keresztes, M. Szűcs, A. Borics, K. E. Kövér, E. Forró, F. Fülöp, C. Tömböly, A. Péter, A. Páhi, G. Fábian, M. Murányi, G. Tóth, *J. Med. Chem.* (2008) 51, 4270.

Bruckner-termi előadás

Deák Andrea

MTA TTK Szerves Kémiai Intézet, Budapest | deak.andrea@ttk.mta.hu

Arany(I)tartalmú szupramolekulák szintézise és egykristály-röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározása

A szupramolekuláris kémia még mindig fiatal területe a kémiának, amely a biológiából vett molekuláris önszerveződés elvének felhasználásával a fizika, az elektronika, a kémiai technológia, a nanotechnológia számára potenciálisan hasznos anyagokat képes létrehozni. A szupramolekuláris kémia a nem kovalens kötések kémiája, és definíció szerint ez a típusú kémia már a „molekulákon túli” rendszerek kémiája. Éppen ezért nem véletlen, hogy a korszerű szupramolekuláris kémia csak a múlt század nyolcvanas éveiben kezdett el kibontakozni, amikor a modern szerkezetvizsgálati módszerek is rohamos fejlődésnek indultak és alkalmazásukkal lehetővé vált a szupramolekulák szerkezet-

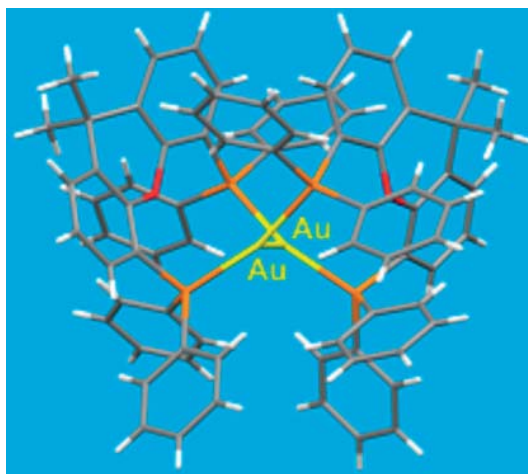
meghatározása. Az 1987-ben Donald J. Cram, Jean-Marie Lehn és Charles J. Pedersen számára odaítélt kémiai Nobel-díj már a szupramolekuláris kémia fontosságának az elismerését jelentette. [1]

A lumineszcens, katalitikus, redoxaktív és/vagy biológiai szempontból jelentős fémcentrumoknak a szupramolekulákba történő beépítésével változatos alakzatú és méretű, sokszor szokatlan tulajdonságú rendszerek állíthatók elő. Az arany(I)tartalmú szupramolekulák vizsgálatának részeként arra kerestük a választ, hogy az arany(I)ionok és megfelelően megválasztott ligandumok önszerveződési reakciója milyen egyedi szerkezetű és sajátosságú szupramolekulákat eredményez. A nagyméretű szupramolekulák



röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározásához szükséges egykristályok előállítása sokszor „vegyszert próbál” feladat és csak nagyszámú kristályosítási kísérlet elvégzésével valósítható meg. Tanulmányoztuk a Me_2SAuCl , *bisz*-difenil-foszfín- (diphos) ligandumok és AgNO_3 1:1:1 molarányú önszerveződési reakcióját, és egykristály-röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemeztük az így kialakított kétmagvú $[\text{Au}_2(\text{diphos})_2(\text{NO}_3)_2]$ komplexeket. [2–4] A *királis* nyolcas konformációjú rövid aurofil $\text{Au}\cdots\text{Au}$ kötést tartalmazó kétmagvú $[\text{Au}_2(\text{xantphos})_2]^{2+}$ (xantphos = 9,9-dimetil-4,5-*bisz*(difenil-foszfino)-xantén) makrociklus kristályrácsában a jobb- és balkezes enantiomerek is megtalálhatók voltak. [2] Az erős hidrogénkötések kialakítására alkalmas funkció csoportot tartalmazó nixantphos-ligandum és arany(I)ionok önszerveződési reakciójából képződő királis kétmagvú kétszálú $[\text{Au}_2(\text{nixantphos})_2]^{2+}$ (nixantphos = 4,6-*bisz*(difenil-foszfino)-fenoxazin) helikát kristályosítási folyamatában az oldószernek a megváltoztatása a helikát *spontan resolválását* idézte elő. [3] Az $[\text{Au}_2(\text{cisz-dppe})_2](\text{NO}_3)_2$ (*cisz-dppe* = *cisz*-1,2-*bisz*(difenil-foszfino)-etén) komplex vendégmolekula-kiengedéssel és -megkötéssel végbemenő igen ritka *egy kristály-egy kristály átalakulásokban* vett részt. A vegyület kristályrácsa nagyméretű üregek hiányában is képes volt CO_2 -molekulák megkötésére, tárolására, majd a gázmolekulák irányított módon (víz hozzáadása) történő kiengedésére. [4]

Az 1,2-*bisz*(difenil-foszfino)-benzol (dppbz) ligandumot tartalmazó $[\text{Au}_2(\text{dppbz})_2]^{2+}$ -kationok, CF_3COO^- -anionok és N-donor 4,4'-bipiridil (bipy) vagy 1,2-*transz*-*bisz*(4-piridil)-etilén- (bipyen) ligandumok önszerveződési reakciójával előállítottuk az $[\text{Au}_4(\text{dppbz})_2(\text{bipyen})_2](\text{CF}_3\text{COO})_4$ makrociklust és az $[\text{Au}_4(\text{dppbz})(\text{bipy})_n](\text{CF}_3\text{COO})_{2n}$ helikális koordinációs polimert. A felhasznált N-donor ligandumok



A kétmagvú $[\text{Au}_2(\text{xantphos})_2]^{2+}$ makrociklus térszerkezete

egymástól csak egy *transz*-etilén-csoportban különböztek, ez mégis elegendő volt ahhoz, hogy teljesen különböző szupramolekuláris szerkezetek képződjenek. [5]

Szintetikus kémiai szempontból a kétfémes szupramolekuláris rendszerek előállítása igazi kihívást jelentett. Az erős Lewis-sav organoón(IV)kationokból és a gyenge Lewis-bázis karakterű dicianoaurát(I)anionokból sikerült előállítanunk Au-CN-Sn egységeket tartalmazó koordinációs polimereket. [6] Kidolgoztunk egy egyszerű, gyors és hatékony oldószermentes mechanokémiai eljárást dicianoaurát(I)-alapú kobalt(II)-, nikkel(II)-, réz(II)-, cink(II)- és ón(IV)-vegyületek előállítására. [7]

Az így előállított többfémes szupramolekulák érdekes szerkezetük mellett szokatlan ioncsere, gázadszorpciós, vaporekróm (oldószergergőzők hatására intenzív színváltozás), valamint mechanokróm lumineszcencia színének a megváltozás mechanikai hatásra) tulajdonságokat mutattak. [6–8]

IRODALOM

- [1] (a) D. J. Cram, *Angew. Chem. Int. Ed.* (1988) 27, 1009. (b) C. J. Pedersen, *Angew. Chem. Int. Ed.* (1988) 27, 1021. (c) J. M. Lehn, *Science* (1985) 227, 849. (d) J. M. Lehn, *Angew. Chem. Int. Ed.* (1988) 27, 89. (e) J. M. Lehn, *Science* (1993) 260, 1762.
- [2] A. Deák, T. Megyes, G. Tárkányi, P. Király, L. Biczók, G. Pálincás, P. J. Stang, *J. Am. Chem. Soc.* (2006) 128, 12668.
- [3] T. Tunyogi, A. Deák, G. Tárkányi, P. Király, G. Pálincás, *Inorg. Chem.* (2008) 47, 2049. [4] A. Deák, T. Tunyogi, Z. Károly, Sz. Klébert, G. Pálincás, *J. Am. Chem. Soc.* (2010) 132, 13627.
- [5] A. Deák, T. Tunyogi, G. Tárkányi, P. Király, G. Pálincás, *CrystEngComm* (2007) 9, 640.
- [6] A. Deák, T. Tunyogi, G. Pálincás, *J. Am. Chem. Soc.* (2009) 131, 2815.
- [7] Cs. Jobbágy, T. Tunyogi, G. Pálincás, A. Deák, *Inorg. Chem.* (2011) 50, 7301.
- [8] A. Deák, T. Tunyogi, Cs. Jobbágy, Z. Károly, P. Baranyai, G. Pálincás, *Gold Bulletin* (2012) megjelenés alatt.

Náray-Szabó Gábor

Magyar Tudományos Akadémia Könyvtára

Kémiai közlemények – 2011

Korunk talán legjellemzőbb vonása az információrobbanás, melyet a tudomány, ezen belül a kémia elmúlt évszázadban mutatott szédületes fejlődése váltott ki. Az új tudományos ismeretek döntő többsége egyre több és egyre terjedelmesebb szakfolyóiratban lát napvilágot, melyek gyűjtése, tárolása, a publikációkban közölt adatok visszakeresése, rendszerezése és összefoglalása mind nagyobb feladatok elé állítja a kutatókat, különösen a könyvtárakat. Az információrobbanással

párhuzamosan, hatalmas tempóban fejlődik az informatika, ezen belül pedig az Internet, mely akár akarjuk, akár nem, gyorsuló ütemben váltja ki a papíralapú információhordozókat. Ma már a kémiai tárgyú közlemények olvasói sem nélkülözhetik e kényelmes, de sokak számára különböző okoknál fogva félelmetes hálózatot. Az informatika térhódításának tudható be, hogy napjainkban a könyvtár is rendkívül gyorsan változik, ezért át kell értékelni az egy-két évtizede még dogmaként

tisztelt szabályokat, be kell fogadni az újat, miközben meg kell őrizni az értékálló régit. Nem könnyű feladat, folyamatos szellemi erőfeszítést igényel, de éppen ettől szép.

A kémiai tárgyú szakirodalommal kapcsolatos kihívásnak eleget téve, az alábbiakban vázolom fel a helyzetet, az elsődleges közlemények, összefoglalók, monográfiák, publikációs adatbázisok jellegzetességeit, írok a tankönyvekről és a magyar nyelvű tudományosságról. Elemzésem szükség-



ségszerűen túl fog terjeszkedni a szűkebb értelemben vett könyvtári világon, érinti a tudományos élet más fontos vonatkozásait is.

Elsődleges közlemények

Az új tudományos eredményeket a kutatók legtöbbször ún. elsődleges (primer) közleményekben hozzák nyilvánosságra [1]. Ezekben a publikációkban eredeti kutatási eredményekről olvashatunk, a közlés feltétele, hogy előbb a szakterület néhány specialistája (bíró vagy referens) elolvassa, megértse és helytállóan ismerje el az ismertetett eredményeket. A közlemények szerkezete és nyelvezte meglehetősen kötött. A bevezetőben ismertetni kell a kutatás célját és előzményeit, a metodikai részben az alkalmazott kísérleti és számítási módszereket olyan részletesen, hogy egy megfelelően felszerelt laboratóriumban, illetve arra alkalmas számítógépen mások is reprodukálni tudják az eredményeket és a következtetéseket. A cikkben hivatkozni kell mindazokra a korábbi munkákra, melyek megalapozták az adott kutatást, idézni kell azokat, akiknek a kutatásaira közvetve vagy közvetlenül támaszkodtak a szerzők. Az egyes szakterületeken elért legújabb eredményeket rendszerezint néhány speciális folyóirat, a legfontosabbakat pedig a bővebben merítő, szélesebb érdeklődésre számot tartó tudományterületi lap vagy lapok közlik. A legfontosabb, alapvető jelentőségű felismeréseket az általános tudományos folyóiratok – mint a *Nature* vagy a *Science* – hozzák nyilvánosságra, a közlés ezekben a legtöbb kutató dédelgetett álmaiban szerepel. A tudományos eredmények megítélése a legtöbb szakterületen – így a kémiában is – elsősorban a primer folyóiratokban megjelent cikkek alapján történik. Kissé leegyszerűsítve: minél rangosabb folyóiratban minél több cikket közöl valaki mint levelező (vagyis az adott kutatásban meghatározó szerepet játszó) szerző, annál nagyobb megbecsülésre tarthat számot a szakmában.

Miután a tudományt a kormányzatok és a magánszféra is egyre nagyobb összegekkel finanszírozza, egyre inkább előtérbe kerül a tudományos teljesítmény kvalitatív és kvantitatív mérésének jogos igénye. A folyóiratok esetében e mérést a leggyakrabban a Garfield-féle impakt faktor és a cikkek kapott idézetek alapján végzik [2]. Egy folyóirat y évi impakt faktora egyenlő az $y-1$ és $y-2$ év folyamán megjelent összes cikkére az y évben kapott összes idézetnek az illető folyóiratban ebben

az évben megjelent publikációk számához viszonyított arányával. A minősítésre számos más mutatót is kidolgoztak [3], ezek alapján kisebb-nagyobb mértékben eltérő rangsorok adódnak. Természetesen a kutatói közösségekben is kialakul egy szubjektív rangsor a folyóiratok között, ez azonban nem tér el jelentősen a kvantitatív rangsoroktól. Megfigyelhető, hogy a tudományos publikációk számának világszerte tapasztalható növekedésével a folyóiratok impakt faktora is nő, ezt az idősorokon alapuló összehasonlításokban figyelembe kell venni.

Egy szakterület minősítési rangsorában a legelő elhelyezkedő folyóiratok érthetően kiemelt szerepet játszanak, mindenki ezekben szeretne publikálni, ezt szeretné olvasni, mivel az itt elfogadott cikkek az élvonalba tartozó kutatási eredményekről számolnak be. A kémia területén felállított rangsor az **1. táblázatban** látható.

Nem meglepő, hogy az első hétből öt folyóirat összefoglaló cikkeket közöl, ezeket relatíve (egy cikkre vetítve) nyilván többen idézik. A legfontosabb, primer publikációkat közlő folyóiratok a *Nature Materials* és a *Nature Chemistry*, emellett kiemelkednek a kémia valamennyi ágát lefedő folyóiratok, melyek nemcsak a specialisták, hanem az egész kémikus társadalom érdeklődésére is számot tarthatnak. Az impakt faktor jelzi egy-egy részterület helyzetét is, a táblázatból látható, hogy milyen kiemelt érdeklődés övezi a „nano”-tudományokban, a molekuláris méretű, mesterséges szerkezetek megismerésében, felépítésében és hasznosításában elért eredményeket.

Azok a könyvtárak, melyek gyűjtőkörébe tartozik a kémia, nyilván elsősorban az **1. táblázatban** szereplő folyóiratokat rendelik meg, ezeket egészítik ki a speciális területek legfontosabb lapjaival. Így alakul ki a törzsszállomány, mely a könyvtárak bázisát képezi, és melyhez minden anyagi nehézség ellenére ragaszkodnak az olvasók, ha ugyanis ez az állomány egy bizonyos nagyság alá csökken, lehetetlen nemzetközi színvonalú kutatásokat folytatni.

Összefoglaló cikkek, monográfiák és tankönyvek

A kémia, más tudományágakhoz hasonlóan, gyorsan változik, még egy szűkebb szakterület legújabb eredményeit is egyre nehezebb követni. A kutatók munkáját segítik az összefoglaló cikkek, melyek speciális, legfeljebb egy-két fontos szakkérdéssel kapcsolatos legújabb tudástanyagot foglalnak

1	CHEM REV	36,438
2	NAT MATER	33,444
3	CHEM SOC REV	24,643
4	ACCOUNTS CHEM RES	20,330
5	SURF SCI REP	17,954
6	NAT CHEM	17,927
7	ANNU REV PHYS CHEM	15,711
8	ALDRICHIM ACTA	14,000
9	NANO TODAY	13,396
10	NANO LETT	12,832
11	ANGEW CHEM INT EDIT	12,050
12	COORDIN CHEM REV	11,530
13	ADV MATER	11,306
14	ANNU REV ANAL CHEM	10,404
15	J PHOTOCH PHOTOBIO C	10,271
16	ACS NANO	9,962
17	PROG SURF SCI	9,793
18	ENERG ENVIRON SCI	9,488
19	ADV FUNCT MATER	9,442
20	CATAL REV	9,256
21	J AM CHEM SOC	8,981
22	NAT PROD REP	8,865
23	MED RES REV	8,621
24	ADV CATAL	8,500
25	SMALL	8,057
26	ADV ORGANOMET CHEM	7,867
27	J CONTROL RELEASE	7,424
28	ADV COLLOID INTERFAC	7,422
29	INT REV PHYS CHEM	7,195
30	CURR OPIN COLLOID IN	6,938
31	LAB CHIP	6,928
32	TRAC-TREND ANAL CHEM	6,623
33	PROG INORG CHEM	6,583
34	CHEM MATER	6,367
35	CHEMSUSCHEM	6,325
36	PROG NUCL MAG RES SP	6,120
37	GREEN CHEM	6,056
38	ANAL CHEM	5,903
39	CARBON	5,728
40	J CATAL	5,713

1. táblázat. Kémiai tárgyú folyóiratok rangsora a 2006–10-es, öt éves átlagban megadott impakt faktorok alapján [4]

össze. Legtöbb esetben a cikkek szerzői a kérdés nemzetközileg elismert, kiváló szakértői, így az összefoglalóban kifejtett véleményük sokat nyom a latban. Mint fent már írtam, az összefoglaló cikkek és az ezeket publikáló folyóiratok idézettsége igen magas, ez egyenes következménye egy publikációval szemben támasztott általános követelménynek, miszerint minden cikkben ismertetni kell az ott tárgyalt kutatások előzményeit. Mivel az összefoglaló cikkek naprakész információt közölnek egy-egy témáról, idézésük megkönnyíti a korábbi eredmények áttekintését.



Fontos követelmény, hogy az összefoglaló naprakész legyen, a legújabb eredményeket is ismertesse. Monográfiák – vagyis valamely szűkebb témát kimerítően tárgyaló tudományos művek – esetében ez nem mindig sikerül, mert a kézirat nyomdába adása és a mű megjelenése között akár egy évnél is több idő telhet el. Lehet, hogy ez is az oka a monográfiák visszaszorulásának a kémiában, a fiatalabb kutatók már egyre ritkábban használják ezeket a műveket. Szerepüket egyre inkább átveszi az Interneten elérhető tudományos információs anyag. A gyors avulás és a raktározási nehézségek következtében a könyvtárak érdeklődése is csökken a monográfiák iránt. Mivel a monográfiákat elsősorban pályázati támogatásból szerzik be a kutatók, nem mindig szerepeltetik a címeiket a központi katalógusokban, helyenként viszonylag rövid idő után ki is selejtezik azokat, mivel viszonylag gyorsan elavulnak a bennük lévő információk.

A kémia kikristályosodott és időtálló ismeretanyagát különböző tankönyvekben találhatjuk meg, ezek ma is népszerűek, és véleményem szerint nem is helyettesíthetők mással. Megfigyelhető hazánkban az angolszász tankönyvek térhódítása, ezek óriási szellemi és anyagi befektetéssel készülnek, jól érthetően, világosan és viszonylag tömören ismertetik a kémia egy-egy részterületét, látványos ábraanyagot közölnek, ezért itthon is népszerűek. A nemzetközi szinten népszerű művek magyar nyelvű kiadását azonban csak kivételes esetben tartom követendő példának (l. pl. Atkins könyvét [5]). Meggyőződésem, hogy hazai szerzők is képesek arra, hogy kiváló tankönyveket írjanak, és ha erre nem kapnak megbízást, annak a kémia oktatása is kárát látja. Igen fontos ugyanis a magyar szaknyelv, ezen belül a kémiai szaknyelv ápolása és folyamatos fejlesztése, melynek egyik kiemelt terepe a tankönyvek írása és olvasása. Emellett érdemes a doktori értekezéseket is magyar nyelven írni, mert írás közben a doktorandusz és témavezetője együttesen találhatja meg a gyorsan gyarapodó angol szakki-fejezések magyar megfelelőjét. A doktori fokozat elnyerésének egyik fontos feltétele az, hogy a jelölt jól tudjon írni, magyarul és angolul egyaránt, mert csak így tudja eredményeit meggyőzően közölni a tudományos világgal. A világon mindössze negyven nyelv létezik, mely alkalmas a tudomány művelésére, ezek egyike a magyar. Ha tehát nem fejlesztjük folyamatosan a szaknyelvet, el fog halni, ami a magyar kultúra nagy vesztesége lenne. Nem

tartom ugyanakkor a nyelvművelés megfelelő eszközének a primer cikkek közlését magyarul, mert nyelvünk elszigeteltsége miatt az új eredmények így nem jutnának el a nemzetközi tudományossághoz.

Adatbázisok

Az elektronika robbanásszerű fejlődésével a könyvtárban is elterjedtek a számítógépes adatbázisok. Ma már szinte valamennyi kémiai tárgyú folyóirat elérhető elektronikus formában is. A legelterjedtebben használt számítógépes adatbázisok primer publikációkat vagy azok összefoglalóit, továbbá konferencia-cikkeket tárolnak gyorsan és igen hatékonyan visszakereshető formában. Ilyen adatbázis például a Web of Science [6] vagy a Scopus [7], melyekben több millió – köztük kémiai tárgyú – publikáció található. Az adatbázisokban szerzők és tárgyszavak szerint is kereshetünk, ami kényelmes és alapos irodalmazásra nyújt lehetőséget. Megadják az itt tárolt cikkek idéztségét is, ezért a tudományelemzésben is nélkülözhetetlen szerepet játszanak. Más adatbázisokban, mint a ScienceDirect [8] és a SpringerLink [9] több ezer folyóirat több millió cikke, emellett könyvek és konferencia-kiadványok is megtalálhatók. A vegyészek számára különleges jelentőségű a SciFinder, mely a Chemical Abstractsból (CA) vagy a REAXYS [10], ami a Beilstein-adattárból fejlődött ki, és nélkülözhetetlen például a preparatív szerves kémikusok számára. A CA-adattárban a molekulák regisztrációs száma alapján eldönthető, hogy valamely vegyületet előállították-e, izolálták-e már vagy sem, ezért az adatbázis nélkülözhetetlen segítséget nyújt például az előzetes szabadalmi újdonságvizsgálatokhoz. A REAXYS [10] a kémiai kutatást integrált, kémiai reakciókra és konkrét vegyületekre vonatkozó keresési lehetőségekkel segíti, jelentősen megkönnyítve szintézisek tervezését.

A számítógépes szakirodalmi adatbázisok jelentik ma a kémiai irodalom legfontosabb tárházát. Előfizetésük jelentős költségekkel jár, ezért érdemes a kutatóhelyeknek konzorciumokba tömörülni, hogy ezáltal erősebb tárgyalási pozícióba kerüljenek a kiadókkal szemben és árengedményeket érjenek el. A Magyarországon központilag – az Elektronikus Információ Szolgáltatás (EISZ) keretében – finanszírozott, különböző konzorciumok által használt adatbázisokat a **2. táblázat**-ban láthatjuk, a lista gyakorlatilag valamennyi tudományágat lefedi.

Az országgyűlés határozata alapján a

ACM (Association for Computing Machinery) Digital Library
Akadémiai Kiadó Journals Collection
Akadémiai Szótárak
Arts and Architecture Complete
Commonwealth Agricultural Bureau International Abstract
Chemical Abstracts/SciFinder Scholar
Econlit (American Economic Association)
Essential Science Indicators
Food Science and Technology Abstracts
Grove Art Online
Grove Music Online
Institute of Electrical and Electronics Engineers publications
Journal Citation Reports
JSTOR (Journal storage, digitalizált folyóiratok 1665-től)
LION (Literature Online)
Magyar Folyóirat Archívum
MathSciNet
MLA (Modern Language Association)
MUSE (bölcész- és társadalomtudományok)
Nature
Philosophers Index
Reaxys (Beilstein)
Science Magazine
ScienceDirect
Scopus
Springerlink
World Biographical Information System
Web of Science
Westlaw adatbázis (jog)
Zoological Records

2. táblázat. A Magyarországon központilag előfizetett számítógépes szakirodalmi adatbázisok (a vastagítás kémiai tartalmat jelöl)

központi adatbázisok előfizetésével és működtetésével járó feladatokat 2012-től a Magyar Tudományos Akadémia Könyvtára látja el.

Nyílt elérésű publikációk

Mivel a tudományos információ – különösen a legfontosabb folyóiratok és a számítógépes adatbázisok – ára folyamatosan nő, emellett több kiadó is monopolhelyzetben van, mert kiadványai (pl. Elsevier: Science Direct, American Chemical Society: SciFinder) mással nem helyettesíthetők, egyre nagyobb az igény a felhasználók oldaláról a költségek csökkentésére. Ennek legalkalmasabb módja az ún. nyílt elérésű (open access) publikáció, melynek



lényege az, hogy a tudományos eredmények közzétételét és annak költségeit a kiadók helyett a kutatók (pontosabban a munkáltatóik) vállalják. Az olvasók az Interneten keresztül ingyen jutnak az információhoz, ezzel megtakaríthatók a nyomdai és a postaköltségek. A nem kereskedelmi, nyílt elérésű folyóiratok nonprofit formában működnek, ezért a kiadók nem egyszer 20–30%-os profitja sem növeli a költségeket.

Az elektronikus formában, ingyenesen elérhető folyóiratok száma egyre nő, igen valószínű, hogy ezek jelentik a jövőt. Állítástomat az is alátámasztja, hogy az Amerikai Egyesült Államok kongresszusa néhány éve elfogadott egy törvényt, mely előírja, hogy a közpénzből fizetett tudományos közleményeket ingyenesen kell az olvasók rendelkezésére bocsátani. A szerzői

jogokkal kapcsolatos problémákat legtöbbször úgy oldják meg, hogy az ingyenes hozzáférést csak egy bizonyos idő (pl. hat hónap) után teszik lehetővé. Egyre több kiadó elektronikus formában létező folyóirat jelenik meg, melyek szerkesztőbizottsága ugyanolyan magas színvonalat követel meg a beküldött kéziratoktól, mint a nyomtatott folyóiratok esetében. Ilyen például a *Public Library of Science* folyóirata, a *PLoS ONE*, melyben kémiai tárgyú cikkek is megjelennek [11], impakt faktora 2010-ben 4,411 volt [12]. Szerkesztői, bírálói önkéntesek, ez is jelentősen csökkenti a költségeket. Nyílt elérésű hazánkban például a REAL adatbázis, melyben az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatásával létrejött publikációk és kutatási jelentések, illetve az MTA doktori disszertációk találhatók meg [13].

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.

Ezúton mondok köszönetet Vinkler Péternek a kéziratához fűzött részletes megjegyzéseiről és kiegészítéseiről.

IRODALOM

- [1] http://www.ehow.com/about_5106012_definition-research-article.html.
- [2] E. Garfield, J.H. Sher, *American Documentation* (1963) 14, 195–201.
- [3] Vinkler P., *J. Am. Soc. Inf. Sci.* (2011) 62, 1963–1978.
- [4] Journal Citations Reports, http://admin-apps.webof-knowledge.com/JCR/JCR?RQ=LIST_SUMMARY_JOURNAL&cursor=1&21
- [5] P.W. Atkins, *Fizikai kémia I. Egyensúly, Nemzeti Tankönyvkiadó*, 2002.
- [6] http://thomsonreuters.com/products_services/science/science_products/a-z/web_of_science/.
- [7] <http://www.scopus.com/home.url>.
- [8] <http://www.sciencedirect.com/>.
- [9] <http://www.springerlink.com/>.
- [10] <https://www.reaxys.com/info/>.
- [11] <http://www.plosone.org/article/browse.action?field=&pageSize=10&startPage=0&catName=Chemistry>.
- [12] P. Davis, <http://scholarlykitchen.sspnet.org/2011/06/28/plos-ones-2010-impact-factor/>.
- [13] <http://real.mtak.hu/>.

Székel György^{1,2}

¹INFU, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Németország, ²Hovione FarmaCiencia SA, K+F, Lisszabon, Portugália | gszekely@hovione.com

Milyen magasan lobog ma a tudomány zászlaja?

Gondolattöredékek a tudományos írásról

A tudományos tevékenység, a fokozatos szerzés és az ahhoz szükséges, illetve az azzal járó publikációk jelentős mértékben minősítik a kutatót és a munkájának helyet biztosító intézményt. Az írások a mögöttük álló kutatások hitelességét, komolyságát reprezentálják, éppen ezért tévednek azok, akik félvállról veszik ezek megírását, tudományos közlését. A publikációk minősége, megjelenési helye mind olyan szempont, mely növelheti vagy ronthatja az újabb eredmények elterjedését, felhasználási és hivatkozási arányát. A kutató személyének és intézményének ismertségén túl az ország érdeke is az lenne, hogy a legújabb eredmények messze földön ismertek és elismertek legyenek a szakmában. Eötvös Loránd 1902-ben, Bo-

lyai János születésének centenáriuma óta a következőképpen fogalmazta meg a kutatói tevékenység azóta is gyakran idézett lényegét: „Csak az az igazi tudomány, amely világra szól; s ezért ha igazi tudósok és – amint kell – jó magyarok akarunk lenni, úgy a tudomány zászlóját olyan magasra kell emelnünk, hogy azt határainkon túl is meglássák, és megadhassák neki az illő tiszteletet”¹.

Az említett tisztelet elérése komoly kihívás, mely több tényező függvénye, magában foglalja a kutató munkájának, eredményének fontosságát, közlésének közérthető megfogalmazását, stílusát és a tudományos élet szereplőinek közös célja a legújabb eredmények közlése mellett azok hitelességének biztosítása. És miért olyan fontos ez? Azért, mert manapság a hírek központi elemeként tűnt fel a plagizálás, mint más szellemi tulajdonának szándé-

kos ellopása, felhasználása, hazánkra vonatkozóan ezzel a nemzetközi sajtó figyelmét. Természetesen a hazai média hibájának is tekinthető, hogy a kiszivárgott hírt első pillanattól kezdve kész tényként közölte, s nem gondolt a valódi tudományos életet folytatók jó hírének veszélyeztetésére.

Az öröm az ürömben még ebben is megtalálható, hiszen az ismert probléma újbóli előkerülése kapcsán lehetőség nyílik a plagizálás lényegének és erkölcsi veszélyeinek átgondolására. Az Oxford-szótár szerint plagizálást követ el valaki, amikor más munkáját vagy gondolatát sajátjaként tünteti fel. A plagizálásnak különböző mértékei lehetnek. A szó szerinti plagizálás mások gondolatának sajátunkként való feltüntetése az eredeti szöveg megváltoztatása nélkül. Mivel más munkájának a szó szerinti birtoklása a szellemi termék lopásának a legkihívóbb formája, ez ritkán fordul elő, hiszen ennek leleplezése nem bo-

¹ Eötvös Loránd, *Beszéd a kolozsvári Bolyai-emlékünnepeken, Akadémiai Értesítő*, 1903, 110. (Környei-kötet alapján)



nyolult folyamat. Az előbb említett teljes szöveg lopása mellett a véletlen, illetve a szándékos eltulajdonítása egy-egy gondolatmenetnek éppúgy plágium. A harmadik szintje a plágiumnak, mikor egy olyan műből idézünk, mely szintén kölcsönözte az idézetet. Ilyen esetben fontos visszakeresni az eredeti művet, s megnézni annak valós formáját, szövegkörnyezetét, hogy ezzel elkerüljük a plagizálás legbanálisabb hibáját, a téves idézést. A helyes idézés nemcsak erkölcsi szempontból, hanem tartalmi vonatkozásban is fontos.

A plágium elleni küzdelem ugyanakkor ma Magyarországon még mindig nem elégséges. Míg az akadémiai körökben sok helyen tabuként tekintenek a témára és az oktatásban is kevés szó esik róla, komolyabb eredmény, véleményem szerint, még nem mutatható fel. A diákok egyre gyakrabban használják a „másolás-beillesztés” billentyűkombinációt egy-egy diákköri dolgozat, diplomamunka vagy doktori disszertáció írása közben. A különböző eszszék összeollózása egyre inkább jelenséggé válik a felnövekvő digitális generációban, ami az egyetemi oktatás fokozottabb figyelmét, egységesebb fellépését kívánja meg, például a tárgyi ismeretek tanítása mellett a tudományos írás etikájának beemelését az oktatásba. Egyes egyetemek és kiadók rendelkeznek már a „plágium-detektáló” programokkal, amelyek egy adott dolgozat, illetve kézirat összehasonlítását végzik el az adatbázisukban szereplő publikációkkal.

A probléma az, hogy a nem angol nyelvű irodalom eredetiségének ellenőrzése jóval nehezebb feladat, mivel a tudományos publikációk nagy része angol nyelven jelenik meg, így az említett szoftverek angol nyelvűek, s nem tudják kezelni a magyar nyelvű dokumentumokat. Érdemes hangsúlyozni, hogy az angolról magyarra történő fordítás még nem jelenti azt, hogy nem követünk el plagizálást. A félreértések elkerülése végett a legegyszerűbb a szakirodalom elolvasása után saját szavainkkal megfogalmazni azt, amit közölni szeretnénk az írásunkban és véletlenül sem használni a „másolás-beillesztés” parancsokat. Amennyiben szó szerint idézünk, mindig használjunk idézőjelet és tüntessük fel a pontos forrást, valamint ha nagyobb terjedelmű részt szeretnénk átvenni egy publikációból, kérjünk írásos engedélyt a kiadótól és szintén tüntessük fel a pontos forrást. Miért a kiadótól és nem közvetlenül a szerzőtől? Az elkészített cikk kéziratának leadásakor közvetlenül vagy publikálásra való elfogadásakor a szerzőnek

alá kell írnia a kiadó által küldött nyilatkozatot a kiadási jogokról, amely gyakorlatilag ezen jogok szerző által történő át ruházását tartalmazza a kiadóra. Alapvetően minden jog a kiadót illeti meg, például a cikk egyes elemeinek publikálásához egy másik cikkben, legyen az ábra vagy szöveg, a kiadó és nem a szerző engedélyére van szükség. A kiadó általában hozzájárul az átvételhez a forrás egyértelmű feltüntetése mellett, ezáltal is elősegítve az eredeti közlemény szélesebb rétegekhez való eljutását. A kiadók publikációs jogkezelése változó, érdemes az adott kiadó honlapján tájékozódni a copyright, copyright policy, copyright transfer, illetve az author's rights menüpontokban vagy a Nottinghami Egyetem RoMEO adatbázisában (<http://www.sherpa.ac.uk/romeo>). Érdemes hangsúlyozni, hogy akár saját kiadott cikkünk egyes elemeinek újrapublikálásához is írásbeli engedélyre van szükség a kiadótól az adott szerzői jogoktól függően.

Az 1997-ben alakult Committee on Publication Ethics (COPE) célja, hogy a szakfolyóiratok szerkesztőinek, tudományos írásművek szerzőinek és tudományos kutatással foglalkozó intézményeknek információt nyújtson a publikálás etikájáról. Irányelveket fogalmaz meg és javaslatokat tesz a tudományos közleményekkel kapcsolatos visszaélések észlelésére, megelőzésére és kezelésére. Honlapjukon keresztül ingyenes online tanfolyamon is részt vehet az érdeklődő, amely a plagizálás, adatmanipulálás, redundáns közlemények, etikátlan kutatás, szerzőség, bírálói visszatekintés, szerkesztői felelősség és szerzői összeférhetetlenség kérdésköröket fedi le és további irodalmat, illetve a kérdéskörrel foglalkozó intézményeket ajánl.

Az utóbbi pár évtizedet figyelembe véve komoly változások történtek a tudományos publikálások terén, hiszen jelentőségük, illetve az információáramlás maga is jelentősen megnőtt. Mára az Internet segítségével a publikációs tevékenység teljes

jük a keresett cikkeket, valamint a kiadók hírleveleire feliratkozva azonnal értesítést kaphatunk egy adott témában újonnan megjelent cikkekről, konferenciákról. Ugyanakkor az információ ilyen gyors terjedése az Interneten már-már követhetetlené válik, és ezt a káros kihasználva a plagizálás egyre nagyobb mértéket ölt.

A plagizálás valamennyi fentebb említett formájának az elkövetése bűncselekménynek minősül, melynek büntetése elkövetőjének tudományos fokozatától függ. Egyetemi hallgatók esetében a büntetés az évközi feladat „visszadobásától”, az adott tárgyból történő bukáson keresztül egészen az egyetemi tanulmányokból történő kizárásig terjedhet. A tudományos karrier későbbi szakaszában dolgozó kutató esetén a plagizálás vezethet a szakmai körökből és a tudományos publikálásból történő kizáráshoz, illetve jogi perekhez vagy akár a betöltött pozíció vagy állás elvesztéséhez. És mindez miért? A csábítás és a könnyebb út választása és azon való járás idővel úgyis mindig megboszulja magát, kerüljön az ember bármilyen magas pozícióba, mindig a feje felett lebeg majd a múltbeli lopás, mint Damoklész kardja. Nem beszélve arról, hogy a tudományban dolgozók pontosan átérzik más szellemi termékének, tulajdonának jelentőségét, a mögötte rejlő megfeszített munkát, a hosszú éveket, így annak ellopása, vagy hiányos hivatkozása több egyszerű lopásnál. Míg a törvény határozottan fellép a tárgyi lopásokkal szemben, a kutatók, vagyis a mi felelősségünk, hogy a tudomány érdekeit szem előtt tartva kutatásainkat és azok közlését véletlenül se szennyezzük be kifogásolható, majd az egész munkánkat emiatt megkérdőjelezhető részekkel, idézetekkel. Szellemi tulajdonunk kincs, melyet a tudomány és az emberiség fejlődése számára ajánlunk fel, így ott lopott gondolatnak nincsen helye.



egészében online folyik, a szakirodalmi adatbázisok (például a Web of Science, Reaxys, ScienceDirect, SciFinder, Compendex) könnyen elérhetők és a különböző szűrők segítségével egy-két gombnyomással megtalálhatjuk és azonnal le is tölthet-

FELHASZNÁLT ÉS AJÁNLOTT IRODALOM

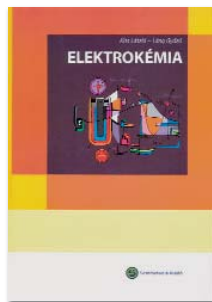
- Sutherland-Smith W., Plagiarism, the Internet and Student Learning: Improving Academic Integrity, Routledge Kiadó, New York, USA, 2008, ISBN 978-0415432931.
- Glasman-Deal H., Science Research Writing, Imperial College Kiadó, London, UK, 2010, ISBN 978-1-84816-309-6.
- The Complete Guide to Referencing and Avoiding Plagiarism, Open University Kiadó, Berkshire, UK, 2010, ISBN 978-0335241033.
- B. Martin, Plagiarism and responsibility, Journal of Tertiary Educational Administration (1984) 6, 183–190.
- Kollár I., Tudományos publikálás hatékonyság (http://www.mit.bme.hu/services/pubinfo).
- Marcus A., Oransky I., What's behind paper retractions?, Lab Times (2011) 6, 49.
- COPE (http://publicationethics.org).



Új egyetemi tankönyv

Kiss László, Láng Győző: *Elektrokémia. Semmelweis Kiadó és Multimédia Stúdió*

A hazai egyetemi, főiskolai természettudományos képzésben az elektrokémiai ismeretek tanítására a fizikai kémia alaptárgy, illetőleg általános kémiai szintű tárgyak keretében kerül sor. Sajnálatos módon az illető tárgyak tankönyvei mind rövidebb terjedelemben, mind kisebb hangsúllyal tárgyalják az elektrokémiai jelenségeket, ismertetik az elektrokémiai módszerek elméleti alapjait, speciális sajátosságait. Ennek illusztrálására elég megemlíteni Atkins Fizikai kémia című könyvét, amelyet a hazai természettudományi karokon használnak. Ez a magyar nyelvre lefordított háromkötetes tankönyv az elektrokémiai ismereteket röviden, három különálló helyen, külön kötetekben tárgyalja.



Örvendetes, hogy a közelmúltban a Semmelweis Kiadó gondozásában megjelent a Kiss László–Láng Győző szerzőpáros „Elektrokémia” című könyve. A tankönyv szerzői az ELTE Fizikai Kémia Tanszékén működő nagy hírű elektrokémiai iskola professzorai.

A könyv nagymértékben támaszkodik Kiss László „Bevezetés az elektrokémiába” című 1997-ben megjelent, ma már nehezen beszerezhető munkájára. Annál kissé rövidebb, mindössze 260 oldal terjedelmű.

A munka fő előnye, hogy az elektrokémiai jelenségeket könnyen követhető módon, de a kémiai termodinamika, a transzportfolyamatok, az egyensúlyok és a reakciókinetika fizikai kémiai tárgyalási módját követve, azok összefüggéseit használva mutatja be. Utal az összefüggések érvényességi területeire.

A könyv négy fő fejezetből áll. „A kémiai termodinamikai folyamatok egyensúlya és sebessége” című első fejezet rövid összefoglalást ad a termodinamikai állapotfüggvényekről, a főbb termodinamikai mennyiségek közötti alapösszefüggésekről. Bemutatja a kémiai potenciál és az elektrokémiai potenciál fogalmát, azok szerepét, különbözőségét. Szemléletes metszeti képen mutatja be a határfelületen létrejövő potenciálkülönbséget (Galvani-potenciált) és annak összetevőit, a felületi potenciált és a Volta-potenciált. Kitér az aktivitás és az aktivitási koefficiens definíciójára. Röviden emlékeztet a kémiai egyensúlyok általános termodinamikai alapösszefüggéseire és a kémiai reakciók sebességére vonatkozó ismeretekre.

A második 75 oldal terjedelmű fejezet az elektrokémiai rendszerekben kialakuló egyensúlyokkal foglalkozik. A fejezet két fő részből áll. Az első rész a homogén rendszerekben, főleg elektrolitoldatokban kialakuló egyensúlyokat tárgyalja. Így foglalkozik az elektrolitoldatok szerkezetével, a disszociációs egyensúlyok mennyiségi viszonyaival, a sók hidrolízisével, a pufferoldatok sajátágaival, a kevésbé oldódó sók oldhatósági egyensúlyával. Megadja a közepes ionaktivitási koefficiens kiszámítására használható, Debye–Hückel-elmélet alapján adódó egyes formulákat. Rövid részek szólnak a polielektrolitok és az elektrolitolvadékok sajátosságairól.

A fejezet második része a heterogén elektrokémiai rendszerek egyensúlyi viszonyaival foglalkozik. Tárgyalja a határfázisokon kialakuló elektromos kettős réteg létrejöttének okait. Vázolja az elektrokémiai cellák általános felépítését, a cellák bemutatására használatos celladiagram jelrendszerét. Megmutatja a cella potenciálkülönbségének definícióját, az illető különbség számítására használt konvenciót, a cellareakció-irány megállapításának termodinamikai

módját. Szól a cellareakció-hő és a cellareakció potenciálja közötti kapcsolatról. Külön rész foglalkozik a koncentrációs cellák felépítésével, fajtáival. Bemutatja, hogy az átvitel nélküli koncentrációs cella felhasználható közepes aktivitási koefficiens meghatározására.

A fejezet további része az elektródok elektrokémiai szempontból fontos sajátosságainak bemutatásával foglalkozik. Különböző iskolák sok esetben egymástól eltérő csoportokba osztják az elektródokat. A szerzők a gyakorlatban használt elektródokat egyszerű és keverék elektródok csoportjába sorolják. Az egyszerű elektródokban csak egy elektródfolyamat zajlik. Az egyszerű elektródokat három csoportba sorolva tárgyalják. Ezek szerint vannak elsőfajú elektródok, másodfajú elektródok és redoxi-elektrodok.

Az elsőfajú elektródok között szólnak a fémelektrodokról, az amalgámelektrodokról és a gázelektrodokról. A másodfajú elektródok között bemutatásra kerülnek a jól ismert ezüst/ezüst-klorid elektród, a kalomelektrod és egyes ritkábban használt elektródok. A redoxi-elektrodok közül szó van a Fe(III)/Fe(II) elektródról és a kinhidronelektrodról.

Az elektródok sorába nem besoroltan foglalkozik a könyv az egyensúlyi membránpotenciállal, a membránelektrodokkal. Igyekeznek bemutatni az ionszelektív elektródokat, egyszerűen magyarázni azok működését, szelektivitását. A fejezet utolsó része a határfelületi kettős réteg szerkezetével foglalkozik.

A harmadik, „Folyamatok elektrokémiai rendszerekben” című fejezet két fő részből áll. Az első a homogén elektrokémiai rendszerekben végbemenő transzportfolyamatokkal foglalkozik. Szól az elektrolitoldatokban végbemenő diffúziós folyamatokról, a diffúziós potenciál kialakulásáról, nagyságáról, a másodfajú vezetők áramvezetési sajátosságairól. Tárgyalásra kerül a vezetés függése a koncentrációtól, a hőmérséklettől.

A fejezet második része az elektródfolyamatok kinetikájával foglalkozik. Az első oldalakon kerül sor az elektródfolyamat nyolc lépésének bemutatására, a polarizációs görbe készítésének leírására, a túlfeszültség okainak, fajtáinak elemzésére. Igen értékes rész az átlépési gátlás szemléletes ábrák és könnyen érthető egyenletek segítségével történő bemutatása. A polarizációs görbék alakjának megértését segíti a diffúziós gátlás tárgyalása. Az egyszerű diffúziós viszonyokat biztosító forgó korong- és forgó gyűrűs korongelektrod alkalmazása is említésre kerül.

A könyv negyedik fejezete néhány, az elektrokémia gyakorlati alkalmazásával kapcsolatos érdekességet tárgyal. A fejezet első része az elektrokémiai korrózió sajátosságairól, a korrózió elleni védekezés módjairól szól. A második rész elektrokémiai áramforrások, galvancellák felépítését, működését mutatja be. Szól a mind inkább érdeklődés középpontjába kerülő tüzelőanyag-cellákról is. Rövid rész foglalkozik az elektrolízis gyakorlati szempontból fontos sajátágaival, bemutat néhány elektrokémiai ipari folyamatot.

Az egyes fejezetek végén tíz–tíz gyakorló feladat segíti az anyag rögzítését. A könyv a fontosabb fizikai mennyiségek jeleit, neveit, állandók értékeit összefoglaló táblázatokat tartalmazó, a Debye–Hückel-modellt és a Lippmann-egyenletet bemutató Függelékkel zárul.

A könyv tulajdonképpen a kémia-, biológia- és gyógyszerész-hallgatók számára készült kiváló tankönyv. Emellett az elektrokémia egyes módszereit alkalmazó felsőfokú végzettséggel rendelkező kollegák számára is hasznos olvasmány.

Nagy Géza

Let's meet in Prague!



Prague is the venue of the 4th EuCheMS Chemistry Congress. (Photo: Pavel Drasar)

EuCheMS, the Czech Chemical Society and their institutional and business partners invite scientists of all chemical and related disciplines to join the 4th EuCheMS Chemistry Congress (4ECC), taking place in Prague, Czech Republic, August 26 to 30, 2012. We invite you not only to the Congress but to a fascinating destination. August in Prague and in whole Bohemia is still a part of the holiday season and many attractions and inexpensive options for travel and accommodation are therefore on offer. The organisers will do their best to let you experience valuable time interacting with colleagues from all over the world and we are sure you will enjoy the summer days in our fascinating capital of the Czech Republic.

The main themes of the Congress are: analytical chemistry and electrochemistry, education/history and professional chemists, food chemistry, environment and green chemistry, inorganic chemistry, life sciences, nanochemistry and nanotechnology, organic chemistry and polymers, physical, theoretical and computational chemistry, solid state chemistry.

There will be many programme highlights. A number of Nobel Prize winners and around 200 prominent chemists are on the preliminary list of plenary and keynote speakers who have agreed to present their lectures at 4ECC, among them:

- Vlasta Bonacic-Koutecký (Germany): Metal-cluster enhanced photochemistry and photophysics

- Aaron Ciechanover (Israel): The ubiquitin proteolytic system
- Gerhard Ertl (Germany): Catalysis at surfaces
- Richard Ernst (Switzerland): Chemistry and ethics in science
- Robert H. Grubbs (USA): Design and applications of selective reactions of olefins
- Jean-Marie Lehn (France): From supramolecular chemistry towards adaptive chemistry
- Roger Y. Tsien (USA): Breeding and building molecules to image cells, electric fields, and disease processes
- Kurt Wüthrich (USA): NMR – Where physical chemistry meets biology and medicine
- Ada Yonath (Israel): The amazing ribosome

Among several important awards that will be presented at the Congress, the European Young Chemist Award has already a good tradition. Additional events will be presented, for example the Career Days, a historical overview on “Preserving scientific heritage: Prague monuments related to history of chemistry” and a very practical presentation on “Beer: Chemistry from the first glass to a hangover”.

Some bursaries will be available for participants although the number will be dependent mainly on the number of sponsors. For congress attendees inexpensive (for Prague) hotel accommodation and also student dormitories rooms for those interested are available. Please check the web pages at www.euchems-prague2012.cz.

Pavel.Drasar, Pavel.Drasar@vscht.cz

Around 4ECC in Prague

Congress venue

The 4th EuCheMS Chemistry Congress from August 26 to 30 will be held in the Prague Congress Centre (5. května 65, 140 21 Prague 4, www.kcp.cz), a venue with easy access to many hotels in near vicinity. With the subway located within just two minutes walking distance, the very heart of the city can be reached in a matter of minutes.

Airfare discount

The network of Star Alliance member airlines is appointed as the Official Airline Network for 4th EuCheMS Chemistry Congress. Registered participants plus one accompanying person travelling to the event qualify for a discount of up to 20 percent, depending on fare and class of travel. Discounts are offered on most published business and economy class fares, excluding internet fares, senior and youth fares, group fares and Round the World fares.

www.euchems-prague2012.cz/airfare-discount.htm

Accommodation

Rooms at special Congress rates are being held in hotels of different categories close to the venue (Prague Congress Centre). Rooms will be allocated on a first come, first served basis. Participants are recommended to reserve the accommodation by May 25, 2012. After this deadline requests will be accepted, however, hotel rooms are subject to availability and cannot be guaranteed.

www.euchems-prague2012.cz/accommodation-guidelines.htm

Important dates

May 5: Abstract submission deadline

May 5: Regular registration deadline

May 5: Application deadline for European Young Chemist Award

May 31: Exhibition space booking deadline

August 15: Late registration deadline (after August 15: On-site registration)

August 26: Opening Ceremony

More information is available on www.euchems-prague2012.cz

New sectors for the EIT

In 2011, sectors for three new Knowledge Innovation Communities (KICs) were considered by the European Commission (EC) for 2014 and the selected areas were food, healthy living and raw materials, all of which involve chemists and chemistry. The EC has allocated a budget of 2.8 billion Euro in 2014 to 2020 to enable the European Institute of Innovation and Technology (EIT), based in Budapest, to expand and consolidate the development of its KICs.

The Knowledge Innovation Communities were created by the EIT, with the goal of increasing European sustainable growth and competitiveness by reinforcing the innovation capacity of the Member States and the EU. KICs operate by linking the higher education, research and business sectors to boost innovation and entrepreneurship.

The EC also adopted a proposal for the EIT's Strategic Innovation Agenda, which defines the framework for its operations in the years to come. This will provide an impetus for creating up to 600 start-up companies and for training 25 000 students and 10 000 PhDs in new curricula that combine excellent science with a strong element of entrepreneurship.

The first three KICs were established in 2009 (climate change and mitigation, sustainable energy and information communication technology), and these have been working to facilitate the transitions from idea to product, from laboratory to market and from student to entrepreneur by integrating the three sides of the knowledge triangle (higher education, research and business) in areas of high societal need.

Livia Simon Sardadi, sarkadi@mail.bme.hu



The International Year of Chemistry continues in France

The International Year of Chemistry 2011 was closed last December in Paris with the exhibition "Regards sur la Chimie" ("Chemistry at a glance"), held at the National Museum of Technologies, the place where one can visit the genuine laboratory of Lavoisier.

"Chemistry at a glance" is an invitation to thought and dialogue between the chemist community and society at large, about aspects such as coastal protection, cancer therapy, skin hydration, energy saving, or to drive cleaner, to collect solar energy, to preserve the quality of air – all topics related to health, beauty, environment, energy or transportation issues.

The aim was to convey a scientific and responsible message to the general public. This ten-poster exhibit, conceived by the Comité Ambition Chimie, was carried out by two photographers, Aldo Soares and Nicolas Guérbe, and was supported by the Ministry of Higher Education and Research and several commercial companies and other organisations: Arkéma, BASF, CNRS, EDF, IFP Energies Nouvelles, Lanxess, Rho-

dia (Solvay group), Total and Yara. In continuation of IYC 2011, the ten large posters will travel to several cities of France. The concept can be used by all the Member Societies of EuCheMS on request.

Marie-Claude Vitorge
marie-claude.vitorge@
societechimiquedefrance.fr
www.regards-sur-la-chimie.fr



News from and for European young chemists

2011 was a successful year that brought a massive inspiration for the promotion of chemistry in our daily life – something we hope to continue into 2012 and beyond.

In May, delegates of the European Young Chemists Network (EYCN) will gather together in Aveiro, Portugal, to discuss the future activities of European young chemists. Our Delegates Assembly will also host the award ceremony of the EuCheMS Award for Service that was conferred upon José Manuel Empis. We hope that this ceremony will emphasise the strong connection and ongoing cooperation between EYCN and EuCheMS.

2012 will also be a big year for EYCN with a two day event at the EuCheMS Congress in Prague made by and for young chemists: EYCN Career Days. Together with GDCh, we will be holding workshops, CV clinics and seminars in

Prague to teach you how to write outstanding scientific articles and effective grant proposals. Follow us on Facebook, Twitter or on our webpage for more info and updates to our programme.

Another big topic in Prague will be the European Young Chemist Award 2012 sponsored by the Italian Chemical Society and Consiglio Nazionale dei Chimici. It is intended to showcase and recognise the excellent research being carried out by young scientists working in the chemical sciences. The finalists will present their work on Wednesday 29 August. It will follow the 2006, 2008 and 2010 European Young Chemist Awards awarded at the European Chemistry Congresses in Budapest, Torino and Nuremberg respectively.

Viviana Fluxa, viviana.fluxa@eycn.eu
www.eycn.eu, www.eyca2012.org

Sweden's short IYC videos

Where does the color in our jeans come from? How can Gore-Tex be waterproof and breathe at the same time? What is the greenhouse effect? These questions (and many others) have been addressed in the Chemistry Calendar, a series of twelve short videos produced during the International Year of Chemistry (IYC) 2011. The project was recently acclaimed as Sweden's most innovative and successful activity during IYC 2011.

The Chemistry Calendar is a joint project between Molecular Frontiers, an international outreach organisation, Chalmers University of Technology, University of Gothenburg, science center Universeum and Untamed Science, a small movie company specializing in fun and educational science videos. Working together, they created twelve videos (one for each month of the year) not only to illustrate how chemistry plays an important role in everyday life, but also to point to the future by highlighting ongoing research.

"We combine scientific content with humor, adventure and action. Our goal is to inspire the audience to want to learn more," says Per Thorén of Molecular Frontiers, who initiated the project. "The videos appeal to kids in all age groups – but are also appreciated by many adults." Each video is



Jonas Stenström, one of the filmmakers, in the November video where the theme was food.

approximately five minutes long, which makes it easy to use the videos in various contexts, such as during a lesson at school.

Teaching material has been created in conjunction with each video and is available for download on the Molecular Frontiers website www.moleclues.org. The teaching material contains background facts and descriptions of experiments of varying degree of difficulty that can be carried out in a classroom. On the website are also games, news and interviews that relate to the content in each video. The videos are published on YouTube, from where they can be embedded on websites and blogs.

*Agneta Sjögren, agneta@chemsoc.se
www.youtube.com/chemistrycalendar*

EuCheMS contribution to the European Research Area

In late 2011 the European Commission launched a public consultation on areas of untapped potential for the development of the European Research Area (ERA). The consultation aimed to reinforce the Commission's analysis of the key issues to be addressed as well as to gather views on their importance. These key issues are:

- researchers
- cross-border operation of research organisations
- research infrastructures
- knowledge circulation
- international dimension
- managing and monitoring the ERA partnership

The outcome of the consultation will help the Commission to draft the ERA framework document which is expected to address the aforementioned issues as priorities. The ERA framework will set out the focused, appropriate and effective measures to be taken to realize the ERA and will focus on non-funding aspects (whereas the financial pillar of realizing ERA will be included in the financial framework Horizon 2020).

EuCheMS conveyed key messages for each of the topics. These are published in detail on EuCheMS webpages.

Nineta Majcen

*nineta.majcen@euchems.eu
www.euchems.eu/publications.html*

Global education: Powerful tools for chemistry teachers

The recently launched EuCheMS report "Chemistry – developing solutions in a changing world" identifies priorities for chemistry research in areas of energy, resource efficiency, health and food, along with the breakthrough science needed to support these goals.

The Royal Society of Chemistry (RSC) has developed a global framework for chemistry education to support the future of these priority areas. The RSC believes that core chemistry in schools and colleges should equip students with the knowledge and skills required to enable them to become the scientists and informed citizens of the future who, ultimately, will be tackling these challenges.

Global frameworks for the 11 to 14 and 14 to 16 age range and the report "Developing a global framework for chemistry education" are available online. These represent the outputs of the first stage of the RSC's wide-ranging project "Global framework for chemistry education".

The frameworks are not intended to represent a curriculum. Instead they represent an illustration of how the contextual approach based on global challenges can be applied to curriculum design in any country. The frameworks have also been populated with examples of how core chemistry content could be delivered in the context of these global priority areas, acting as a powerful tool to aid chemistry teachers.

*Sheena Elliott, ElliottS@rsc.org
www.rsc.org/globalframework*

Global Frameworks for Chemistry Education

for the 11-14 and 14-16 age ranges



RSC
Royal Society of Chemistry

www.rsc.org/globalframework

First Eurodoctorate in Genova

The European Chemistry Thematic Network Association finalised in 2011 all necessary procedures for awarding of a Chemistry Doctorate Eurolabel to PhD programmes. As is the case with other Eurolabels, the awarding process is conducted by the Label Committee. The first university with the Eurodoctorate label is Università degli Studi di Genova who were awarded the quality label for its degree of PhD at the Doctorate School in Science and Technology of Chemistry and Materials (Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie della Chimica e dei Materiali) which includes three "Corso di Dottorato": in chemical technology science, in pharmaceutical, cosmetic and food science or in material science. The initiative was supported by the European Commission in its lifelong learning programme – the project of the Erasmus sub-programme entitled "Eurodoctorate – a framework for a third cycle qualification in chemistry", coordinated by the Aristotle University of Thessaloniki.

Pavel Drašar, Pavel.Drasar@vscht.cz

Chemistry for cultural heritage

Istanbul will host the 2nd International Conference in Chemistry for Cultural Heritage from July 9 to 12, organised by the Turkish Chemical Society. Preservation and protection of our universal cultural heritage of moveable and immoveable natural, archaeological, historical and artistic materials for future generations is the essential responsibility of humanity. Unfortunately, such materials are always faced with the constant threat of environmental pollutants, pests, poor handling practices, natural disasters, international conflicts, accidental damage or just plain neglect. The main agenda is to first stop the deterioration, then to stabilize the material state and finally to conserve it without falsification in order to minimize further decay. The main objective of the Conference is to provide a universal scientific platform for chemists, conservators and restorers to discuss the major issues in conservation and restoration.

*Mehmet Mahramanlioglu
mehmah@istanbul.edu.tr
www.chemch2012.org*

Events 2012

11 – 13 June 2012, Uppsala, Sweden

EuCheMS Analytical Days (Analysdagarna)
www.analysdagarna.se

9 – 12 July 2012, Istanbul, Turkey

2nd International Conference on Chemistry for Cultural Heritage, www.chemch2012.org

5 – 11 August 2012, Wales, UK

EUCHEM Conference Molten Salts and Ionic Liquids
www.euchem2012.org

26 – 30 August 2012, Prague, Czech Republic

4th EuCheMS Chemistry Congress
www.euchems-prague2012.cz

13 – 15 September 2012, Vukovar, Croatia

14th Ruzicka Days: "Today science – tomorrow industry", www.ptfos.hr/ruzicka

16 – 19 September 2012, Bragança, Portugal

11th Food Chemistry Meeting
www.spq.pt/eventos/11eqa

26 – 28 September 2012, Leipzig, Germany

EuCheMS conference Flavors & Fragrances 2012
www.gdch.de/flavorsfragrances2012

14 – 16 November 2012, Prague, Czech Republic

EuCheMS 7th International Conference on Chemical reactions in Foods, www.crf2012.eu

Events 2014

31 August – 4 September, Istanbul, Turkey

5th EuCheMS Chemistry Congress
www.euchems-istanbul2014.org



Prague: Chemistry and ethics at the 4th Chemistry Congress

The special symposium "Ethics in science – chemistry and ethics" at the 4th EuCheMS Chemistry Congress from August 26 to 30 in Prague will be organised by Frank Hartmut, who will have around him well-respected scientists e.g. Attila Pavlath (USA), Marina Frontasyev (Russia), Karine Ndjoko and Frank Moser (Switzerland), Jan Mehlich (Germany), Jan van der Westhuizen (Republic of South Africa), Jerzy Vetulani (Poland) and Luigi Dei (Italy). At the end of this symposium a round table discussion will take place. Finally it is expected that the "Prague Memorandum" will be drafted.

On the occasion of the symposium Carl Djerassi (USA) will be special guest of the Congress and his play "Insufficiency" will be staged as dramatic reading on Wednesday evening. The newest science-in-theatre play deals with the science of "bubbleology" as applied to champagne and beer with a few digs along the way at the foibles of academic publishing, academic snobbery, and academic tenure – an apt illustration of themes pertaining to the "Ethics in science" Congress special topic, but actually of relevance to the entire chemical community.

Pavel.Drasar, Pavel.Drasar@vscht.cz

EuCheMS Newsletter



Newsletter coordinator: Karin Schmitz

Please send all correspondence and manuscripts to k.schmitz@gdch.de

Editors: Wolfram Koch (responsible),

Karin Schmitz, Uta Neubauer, Frankfurt am Main

Advisory board: Wolfram Koch (Chair, Germany),

Luis Oro (Spain), Giovanni Natile (Italy), Nineta

Majcen (EuCheMS Secretariat), Ulrich Schubert

(Austria), Marie-Claude Vitorge (France), Paola

Turano (Italy), Viktor Milata (Slovakia).

Layout: Jürgen Bugler, Frankfurt am Main

Production: Nachrichten aus der Chemie

Publisher: Gesellschaft Deutscher Chemiker on behalf of EuCheMS

Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main
euchems@gdch.de

EuCheMS General Secretary:

Nineta Majcen, Avenue E. van Nieuwenhuyse 4,
B-1160 Brussels

secretariat@euchems.org

www.euchems.org

EuCheMS is registered as "Association internationale sans but lucratif" (AISBL, international non-profit association) AISBL-Registered office: Avenue E. Van Nieuwenhuyse 4, B-1160 Brussels



Kálmán Alajos

Ritka jubileum: Sasvári Kálmán 100 éves!

Egy fejezet a XX. századi magyar tudomány történetéből

1912 húsvétja körül, Max von Laue ötlete alapján, W. Friedrich és P. Knipping egy primitív röntgensugárforrás és az eléje helyezett fotografikus lemez közé egy rézgálic-kristályt helyezett. Kellő expozíció után előhívott lemezen felismert interferenciakép a röntgendiffrakció jelenségének felfedezéséhez vezetett. Hatása az eltelt évszázad során az anyagszerkezet-kutatás azon eszközévé nőtte ki magát, ami nélkül nem tudnánk új molekulák kristályszerkezetét ma már órák alatt meghatározni, de nem volna sem genomika, sem nanokémia.

Két hónappal korábban (1912. február 7-én) Hidason, egy sváb családban Scheibner Kálmán néven megszületett az a férfiú, aki az elmúlt évszázadban Magyarországon a röntgendiffrakciós kristályszerkezet-meghatározások mérés-, majd számítástechnikájának meghonosítójaként beírta nevét mind a hazai, mind a nemzetközi tudománytörténetbe. Öröklött génjein túl a mélyen vallásos katolikus család, amelybe beleszületett, adta azon emberi tulajdonságait, amelyekkel kitűnt környezetéből: a mélyes hit, a hallatlan munkaszeretet, az emberi tisztesség, valamint a bátor helytállás olyan időkben, amikor azok bűnnek számítottak. Hajlíthatatlansága a hamis ideológiák elutasításában mind a Volksbund-szervezés idején, mind 1945 után, a több évtizedes bolsevik uralom éveiben is, példamutatóan közismert volt. A szinte kötelező tudományos minősítésről is inkább lemondott, mintsem marxizmus-leninizmusból vizsgáljon. Emberi helytállása pedig akkor mutatkozott meg, amikor tanítómestere, Náray-Szabó István mellett a háború, majd az azt követő meghurcolása (bebörtönzése) éveiben mindvégig kitartott, s amint lehetett, ismét mellé állt (1957) és haláláig (1972) támogatta.

Pedig a sors őt magát sem kímélte. Első feleségét, csecsemő kislányukkal (Máriával) itt maradván, elveszítette. Szerencsére



Sasvári Kálmán egyetemi hallgató
Náray-Szabó István röntgenkészülőke
mellett 1935-ben

a Mindenható olyan hitvessel (Gabika) kárpótolta, aki még két gyermekkel (László és Kata) ajándékozta meg, és aki 93. életében most is hű társa. A háború után előbb a svábok meghurcolása, majd az ötvenes évek kulákdözsései nem kerültk el családját. Édesanyját, Beck Máriát meghurcolták, megalázták és bebörtönözték. (Ezekről egy tárgyilagos, mégis drámai hangú könyvecskében számol be, ami a Püski Kiadónál 2000-ben *Visszaemlékezés Boldogasszonyra–Margita történetére (Faluépítés–Emberüldözés–Falurombolás 1920–1992)* címmel jelent meg.) Mindezekben az években a saját egzisztenciája is veszélyben forogott. S végül mint Jóbnak, saját megpróbáltatásokat, szenvedéseket is meg kellett élnie. Nyugdíjas éveiben több műtéten esett át, a legutolsó szinte az életét követelte. Mindezek ellenére, bár fizikailag gyengén, szellemileg frissen fogadta jókívánságainkat, gratulációnkat.

**Kálmán bátyánk, az Isten
éltesse!**

Ami e sorok írója számára a Sasvári Kálmántól famulusként kapottakból a *tudományos cikkírássra való könyörtelen, de igényes felkészítés* után a legértékesebb, az a mélyes hazaszeretet. Napjaink fájdalmasan álságos, sokszor nemzetellenes hangoskodásai mellett példamutató, hogyan nevelt az iskolás korig magyarul nem beszélő gyermekből a fent említett milió hazáját szerető és a magyar nyelvet makulátlanul beszélő kutatót, tudóst! A fiát egyedül nevelő édesanyja, Beck Mária 1920 őszén a boldogasszonyfai magyar nyelvű katolikus elemi iskolába íratta be. Magyartudását a pécsi gróf Széchenyi István nevét viselő gimnáziumban tökéletesíti. Érettségi után matematika-fizika szakos hallgatóként a szegedi tudományegyetemre nyer felvételt. Szerencséjére éppen 1931-ben Bay Zoltán és Náray-Szabó István (mint első igazgató) a budapesti mintájára megalapítják a szegedi Eötvös Kollégiumot. Az első tíz diák között Sasvári Kálmán is felvételt nyer, sőt ő lesz a hallgatók képviselője. Amikor kiderül, hogy Náray-Szabó famulusa, Szabó Zoltán (későbbi neves egyetemi tanár, akadémikus) inkább a kémia (katalízis, kinetika), mint a röntgenkrisztallográfia után érdeklődik, Sasvári engedélyt kér a Rockefeller Alapítvány és a Széchenyi Természettudományi Alap támogatásából vásárolt röntgenberendezések használatára. Kérését Náray-Szabó örömmel teljesíti. A mérőberendezések megismerése után rájön, hogy a röntgenspektroszkópia helyett a már húsz éve ismert és sokat fejlődött diffrakciós technika érdekli. Náray-Szabó laborjában dolgozva 1934-ben doktori értekezésének elkészítéséhez témát kér tanárától, aki az AgMnO_4 szerkezetének meghatározását ajánlja. 1936-ban elkészül értekezése, amely-



nek budapesti bemutatásakor (bemutató NSZI) Ortway Rudolf professzor Fourier-számítás elvégzését is javasolja. Nos, ez csak *vetületben*, logarléc segítségével két hónapot igényelt. Fizikus doktori oklevelét 1938-ban kapja meg. Szinte ezzel egy időben Náray-Szabó Istvánt a budapesti József Nádor Műszaki Egyetem Kémiai Fizikai Tanszékére egyetemi tanárnak nevezték ki. Sasvári Kálmán követi mesterét Budapestre. Egy ideig még Szegedről kap fizetést, majd tanársegédi, később adjunktusi besorolásban a Műegyetem alkalmazottja lesz.

Időközben mesterével meghatározzák a kriolit $\text{Na}_3[\text{AlF}_6]$ szerkezetét. Az 1938-ban megjelent dolgozatukból (Z. Krist.) a $P2_1/n$ formában először felírt monoklin tércsoport szerkezeti tényezőinek számítását több szakkönyvben is idézik. A röntgenlaboratórium áttelepítését megoldva először a nádcukor A és B módosulatát vizsgálják, majd önálló feladatként meghatározza az uranil-nitrát tércsoportját (akkoriban ez nagy teljesítmény). Nem szabad megfeledkezni arról, hogy a Műegyetemről való távozásáig (1949) a vegyészmérnök-hallgatók fizikaoktatását is ellátja. Szigorúságára az élők még ma is „áldólag” emlékeznek. A háború éve alatt ösztöndíjat nyer a berlini *Collegium Hungaricum*-ba, amit azonban a bombázások miatt alig tud kihasználni. A rendkívül időigényes, mégis pontatlan diffrakciós adatgyűjtés javítására a világon elsőként a Bay Zoltántól kapott, még a fejlesztés korai szakaszában lévő elektronsokszorozóval mért reflexió-intenzitásokat tanulmányozza. A biztató elővizsgálatokat (1944) csak jóval a háború után (1947–1948) tudja Papp Györggyel publikálni. Kezdeményezésük még így is világszerű.

Budapest ostroma, a Műegyetem súlyos megrongálódása, az újjáépítés, majd Náray-Szabó bebörtönzése (1947) után 1949-ben távozik a Műegyetemről. Millner Tivadar akadémikus meghívására kutatómunkáját a Náray-Szabó tanszékéről átmentett röntgendiffrakciós berendezésekkel az Egyesült Izzó kutatólaboratóriumában folytatja. Itt magános farkasként az elavult fadobozos röntgenkészülékkel és néhány Debye–Scherrer-kamrával küzd a szakmai túlélésért. Az Egyesült Izzóban – csak a legjelentősebb tevékenységét emelve ki – a termelési igényeknek megfelelően speciális üvegek gyártásához szükséges $\text{Al}(\text{OH})_3$ -módosulatok, továbbá az izzószálak minőségének javítását előmozdítandó volfrám-, továbbá molibdén-oxidok diffrakciós és termoanalitikai vizsgálatával

foglalkozik. De a különleges, egyedülálló tudására számos helyen (MTA KFKI, KKKI, továbbá NAKI) ugyancsak számítanak. Ebből következik az igény, hogy a tanszékvezető Pócza Jenő kérésére az ELTE Kísérleti Fizikai Intézetében két féléves kurzusban röntgendiffrakciós és spektroszkópiai speciális kollégiumot tartson. A siker nem maradt el, az 1956-ban Nyugatra távozott Sándor Endre mellett Csordás László, Farkasné Jahnke Mária, Gadó Pál, Menczel György és Zsoldos Lehel egy életre elkötelezték magukat a röntgendiffrakciós vizsgálatok mellett. Távozása után Gadó Pál lépett az örökébe az időközben HIKI-nek átnevezett (átszervezett) kutatólaboratóriumban.

Kilenc év elteltével, 1957 januárjától az MTA Központi Kémiai Kutató Intézetében a meghurcolt, alkotói pályájában megropantott mester (NSZI) és a hűséges tanítvány ismét együtt kezdik meg a közös álmot, a kristályszerkezet-meghatározások folytatását. Egy kis szobában (kb. 10 m²) a továbbcipelte fadobozos röntgenkészülékkel, a laboránsával, majd 1958-tól még egy gyakornokkal (KA) „szoros illeszkedésben” ücsörögve, a Koch Sándor professzortól kapott ZnS-3R néven leírt politip kristálykájáról kezd adatokat gyűjteni oszcillációs felvétel készítésére alkalmas Seemann-féle kamrával. Ebbe a munkába kapcsolódhattam be, mint Náray-Szabó frissen diplomázott asszisztense. Így a diffrakciós technikát Sasvári Kálmántól tanulhattam meg, ma sem felejtve, hogy az oszcillációs felvételek Bernal-hálójával való értékelése milyen sziszifuszi munka. Haszna csupán annyi volt, hogy megtanultam az Ewald-féle reciprok térben tájékozódni. A primitív asztali összeadógepeket birtokolva lassan megtanultam a szerkezeti tényezők számítását, amit azután két év múlva első saját szerkezetmeghatározásomnál ($\text{K}_2\text{Pb}_2\text{Si}_2\text{O}_7$) már önállóan alkalmazhattam. Jubilánsunk ez időben, hogy valami értelmes dolgot is csinálhasson, különböző összetételű ionkristályok legszorosabb illeszkedésen alapuló rácsszerkezetét modellezi. Ezekből kiindulva magas hőmérsékleten (1300 °C) AB_2O_6 típusú rutil testvérszerkezeteket állít elő nagy gondossággal. Természetesen csak porfelvételeket készíthet. Ezenkívül korszerű diffrakciós berendezések (Weissenberg-kamrák) hiányában, csak arra van lehetőségük, hogy külföldről beszerezhető (publikált) adatok alapján közösen revideálják a staurolit háború előtt közölt Náray-Szabó-szerkezetét.

E visszaemlékezés nem fulladhat annak a heroikus harcnak a leírásába, amelyet

jubilánsunk vívott az MTA személyzetisének politikai rosszsindulatával. A felzárkózásunkhoz elengedhetetlen külföldi kiutazásait rendre elgáncsolják. Alagút csupán akkor nyílt, amikor 1959-ben a tavaszi ipari vásáron megvehettük a hamburgi C.H.F. Müller cég automata, Norelco típusú por-diffraktométerét egy STOE-féle Weissenberg-kamrával és egy korszerű Philips-röntgengenerátorral egyetemben. A felhasználóknak a cég költségtérítéssel tanfolyamot szervez. Ezt kihasználva, mint a leleményes Odüsszeusz, a tanfolyamot követően (1960. augusztus) áthajózik a kódós Albionba, hogy Cambridge-ben előbb az IUCr (Nemzetközi Kristallográfiai Unió) V. kongresszusán, majd manchesteri nyári iskoláján is részt vehessen. Ez óriási jelentőségű volt számunkra, mert megismerkedhet a korszerű műszerekkel gyűjtött röntgenreflexiók szerkezetmeghatározásokhoz elvezető és egyre javuló számítógépes feldolgozásához szükséges programokkal. Programkönyvtárunk fejlesztése további munkás éveiben, nyugdíjba vonulásáig, az egész, lassan létszámban is gyarapodó kutatóközösségünk (Argay Gyula, Csonka-Horvai Júlia, Simon Kálmán, Párkányi László, majd első tanítványom, Czugler Mátyás) számára nélkülözhetetlennek bizonyult. Minden lehetőséget megragad, hogy az országban akkoriban elérhető számítógépeket (Ural-1, IBM-628, majd Gier, később ICT-1905, házon belül LGP-21 stb.) munkánkba bekapcsolja. Az első számítógépes adatfeldolgozással meghatározott (1963) szerkezet már a Weissenberg-kamrával kimért $(\text{NH}_4)_2\text{WS}_4$ kristályé volt. Az első adatgyűjtés Argay Gyula diplomamunkájához (1962) a Na_2SeO_4 -ról készül. E szerkezeteket később a K_2SeO_4 szerkezetmeghatározásánál (Manchester, 1969) magam is felhasználom.

Fel nem sorolható erőfeszítéseiben új színfoltot jelentett nyitása a szerves vegyületek irányába. Keglevich László fizikus (ELTE) letartóztatása (1960) után a bruckneri csapat (ELTE Szerves Kémiai Intézet) sztereokémiai problémájának megoldására, azaz hogy a biciklohexilidén $[\text{C}_{12}\text{H}_{20}]$ szék vagy kád konformációjú-e, Lőw Miklós SK-hoz fordul. A kristályról készített Weissenberg-felvételek kiértékelésében Miklós segített, de a C- és H-atomokból álló triklin kristály szerkezetmeghatározása korszerű programok nélkül reménytelen volt. Ekkor indítja el Sasvári Kálmán azt a csatáját a Nádor utca politikai hatalmasságaival, ami az ő hihetetlen kitartása mellett végül 1963 szeptemberében, G. A. Jeffrey professzor meghívására,



pittsburghi kiutazásához vezet. A biciklohexilidén kristályszerkezet-meghatározásának pittsburghi sikere Bruckner professzort meggyőzi a röntgendiffrakció hasznosságáról, melynek hasznélvezője e sorok írója lesz. A tanszék Kucsman Árpád vezette csoportjában előállított kénorganikus vegyületekből a $(\text{CH}_3)_2\text{NSO}_2\text{CH}_3$ kép-letű szulfilimin szerkezetmeghatározása (Párma, 1966) a szerves kémikusoknak nyújtott gondolkodást formáló információk mellett alapvetően meghatározza kutatói jövőmet, melynek formálásában Sasvári Kálmán szigorú, de mindenkor segítő iskolája volt az alap. Pár évvel később, angliai utam (1968–1969) után, amikor programkönyvtárunk – Simon Kálmán közreműködésével – működőképessé vált, több szulfilimin-szerkezetet oldottunk meg közösen. Ezek közül kiemelendő a Kapovits István által szintetizált első spirozulfurán, aminek röntgenreflexióit – Sasvári Kálmán javaslatára – már a STOE cégtől megvásárolt (1970), már ionizációs detektorral felszerelt félautomata Weissenberg-goniométerrel gyűjtöttük össze. Ez a készülék nemzetközi összehasonlításban nem volt csúc, de üzemeltetésével áthidaljuk azt az időt, amit végül a korszerű PDP–11/34 számítógéppel vezérelt Enraf–Nonius CAD–4 diffraktométer 1979-es beszerzéséig eredményes munkával tölthetünk el.

Az új felszereléssel hamarosan elérjük (80-as évek), hogy a világszerte megoldott, majd a CCDC-ben (Cambridge-i Krisztallográfiai Adatbank) regisztrált kristályszerkezetek kb. 0,5%-át laboratóriumunk határozza meg.

Mindezek már 1974-es nyugdíjba vonulása után történtek, de addig még sok mindent el kellett végeznie, amire küldetést érzett. A programozás mellett fontosnak érezte a már hatékony diffrakciós módszer hazai elterjedését, alkalmazását. Egyik első ilyen lépése a Chinoin meghódítása volt. Néhai Mészáros Zoltánban jó partnert találva 1966-tól Csonka-Horvai Júlia kezdi meg a KKKI-ban a Chinoin termékeinek röntgendiffrakciós vizsgálatát. Férjhezmenetelével, majd Erdélybe költözése után (1969) a friss diplomás vegyész Simon Kálmán veszi át a gyári összekötő szerepét, aki SK nyugdíjazása után is évtizedekig kutatócsoportunk aktív külső tagja maradt. A Chinoinnal való igen eredményes kooperációnk intézetben belüli és kívüli elismerése előbb a Richter Gedeon Rt.-vel, majd az Egisszel is gyümölcsöző együttműködéshez vezet. A Bruckner-intézettel kialakított kitűnő kapcsolatunk után a BME Szervetlen Kémiai Tanszékén



Nagy József vezetésével előállított szilícium-organikus vegyületek szerkezetvizsgálatát kezdeményezi. 1970-ben vendégkutatóként meghívja Párkányi Lászlót, akit 1974-es nyugdíjba vonulása után már a diffrakciós vizsgálatokban járatos kutatóként alkalmazunk. Párkányi László a krisztallográfiai számításokhoz való affinitásában részben folytatója lett annak a munkának, amit mestere abbahagyott. Párkányi, akinek gazdag munkássága közül elsősorban a szilatránok, majd a 14-csoport elemei által képzett vegyületek vizsgálata emelhető ki, az MTA doktoraként 2011-ben vonul nyugalmába. Jubilánsunk természetesen kereste a kutatóintézetben belüli kapcsolatokat is, ennek során néhai Messmer András csoportja részére végez értékes szerkezetmeghatározásokat elsősorban a BF_4^- anionnal képzett heterociklusos vegyületek körében.

1976-ban a nemzetközi krisztallográfiai élet egyik kiemelkedő egyénisége, M. M. Woolfson másfél éves ösztöndíjat ajánl fel neki, hogy a yorki egyetemen, a programfejlesztésben (MULTAN) elmerült kutatókat, főleg fiatalokat a mérés technika elsajátításában segítse. Ezt az időt, ottani feladatainak megoldása mellett, arra is felhasználja, hogy itthon maradt csoportunkat a fázisprobléma megoldásának olyan eseteiben segítse, amikor az – a CAD–4 installálása előtt – a meglévő programjainkkal nem volt lehetséges. Publikációs jegyzékeinkből jól következő, hogy kutatócsoportunk minden tagjával publikál, és végleges visszavonulása után is megőrzi érdeklődését azok munkában elért sikerei után, akiknek kutatói pályáját egyengette.

Kálmán bátyánk nem könnyű ember! Egy szóval jellemezve: szigorú volt mindenben. Maximális követelményt támasztott mind magával, mind munkatársaival szemben, amit a rendkívül kedvezőtlen kutatási feltételek ellenére megvalósítandó célkitűzései motiváltak. Laboránsnőjének mondta egyszer: „Siessünk, Jutka, mert előbb meghalunk, mint a munkát befejezőnk.” Nos, bár erre a megélt 100 évével

jócskán rácaffolt, a küszködés végül is nem bizonyult szélmalomharcnak. Ahogy lassan javult a helyzet, egyre türelmesebbé vált, sőt Náray-Szabóval együtt időnként még tarokkozni is leült velünk. Kellemes, sokszor finoman humoros, sőt igaz baráti énje akkor mutatkozott meg igazán, amikor nyugdíjazása után – gondoktól mentesen – yorki tartózkodása (1977) alatt pár napra vendégül látott. Értő idegenvezetőként kísért el e történelmi város múzeumaiba, esténként pedig Gabikával együtt angol társasjátékot játszottunk. Nem felejthetem, hogy milyen hallatlan érdeklődéssel mutatta be a világhírű székesegyház négyzet-oszlopai föld alatti megerősítésének briliáns megoldását.

Ami saját életemet illeti, 54 év töretlen szerelem köt az idei év januárjában megszünt MTA Központi Kémiai Kutató Intézethez. De hogy az első munkaévem frusztrációja és kilátástalansága után is maradtam, az ő vasakarata, példamutató kitartása és megértő biztatása adott erőt a nehézségek további vállalására. Így azután hetvenévesen (2005) mind hazai, mind nemzetközi megméretésben is eredményes kutatócsoportot adhattam át utódomnak, s ebben Sasvári Kálmán helytállása is bennfoglaltatik. Az IUCr nagy családjában jól ismert volt heroikus küzdelme a Náray-Szabó által nemzetközi szinten megalapozott (1931–1944) hazai röntgendiffrakciós kutatások újraindításáért. Az IUCr tisztségviselőjeként (1984–1993) tett tengeren inneni és túli utjaimon Sasvári Kálmán nevét mindig tisztelettel és megbecsüléssel emlegették. Munkásságát az IUCr Commission on Crystallographic Computing tagjaként ismerték el. Itthon a hatalom azt eltűrte, hogy 1972–1985 között az IUCr Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke legyen. Munkásságának megérdemelt tudományos elismerését csak a rendszerváltozás után kezdeményezhettük. Életművére 1993-ban kapta meg a réges-régen kiérdemelt „az MTA doktora” címet.

A sors abban a megtisztelésben részesített, hogy az MKE elnökeként az 1999. évi Náray-Szabó István (1899–1972) centenáriumi ünnepségen átadhattam neki Egyesületünk közös *tanítónk* nevét viselő tudományos díját.

Barátaim, tisztelt olvasóim! A leírtakban azt szerettem volna a még írásolvasó utókornak örökölni hagyni, hogy egy hosszú sötét korban is lehet valaki világító fáklya. S erős hittel sok megpróbáltatás után is megérheti a matuzsálemi kort!

Kérdés: Sors bona nihil aliud?

Válasz: Annál több!





Kucsman Árpád–Jalovszky István

A kémia nem történelem

Első rész

A cím megtévesztő: a kémia ugyanis nem választható el a történelemtől. Történelme van a szénatomnak, mely az ősidőkben magfúzióval keletkezett, meg a C-14 izotópnak is, melynek nitrogénné történő bomlását éppenséggel történelmi körök meghatározására használják. De történelme van az egyetemeknek, ahol a kémiát tanítják, és azoknak a kutatóknak is, akik a kémiát művelik. Ezért a címnek hátat fordítva a továbbiakban éppenséggel történeti vonatkozásokról lesz szó. A téma túlságosan tág, ezért szűkítsük le az első hazai tudományegyetem 243 évvel ezelőtti alapított kémiai intézetére és annak vezető professzoraira. Ezt a beszámolót aktuálissá teszi, hogy ez az egyetem „kerekén” 375 éves, és éppen 60 éve vette fel a világhírű fizikus, Eötvös Loránd nevét.

Nagy Lajos, Zsigmond és Mátyás királyaink próbálkozásai után hazánkban az első, máig is működő egyetemet 1635-ben Pázmány Péter esztergomi érsek alapította a felvidéki Nagyszombat, a mai Trnava városában, 650 évvel a bolognai egyetem létrejötte után. Ez a jezsuita típusú Érseki Egyetem kezdetben bölcsészeti és teológiai karból tevődött össze, jogosult volt tudományos fokozatok adományozására, majd 32 év múlva jogi karral is kiegészült. Egyébként már akkor is használták a manapság újra divatba jött baccalaureatus (BSc), a mester-magister (MSc) és a doctor (PhD) elnevezést.

Az egyetemi kémia első száz éve

A 18. században az ország egyetlen egyeteme egyre inkább állami irányítás alá került és alapítása után 166 évvel, 1769-ben megalakult negyedik, azaz orvosi fakultása, amivel teljes szerkezetű, klasszikus

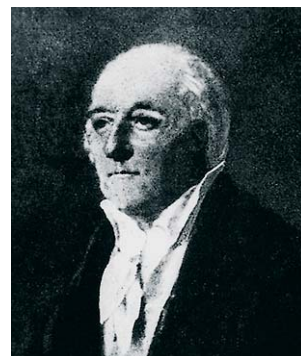
egyetemmé vált. Figyelmünk ettől kezdve összpontosulhat a kémiára. A jezsuita rend pápai feloszlása után az egyetemet 1777-ben Királyi Magyar Egyetem (Universitas Regiae Hungaricae) néven Nagyszombatból Buda városába költöztették, a meglévő királyi palotába – talán spórolásból. A költözés két évig tartott, és Kempelen Farkas, a sakkozógép feltalálója vezényelte. Mária Terézia engedélyével a tróntermet alakították át az egyetem dísztermévé, a királynő tudta ugyanis, hogy sohase fog Budán lakni. Meglepő, hogy II. József, Mária Terézia fia az intézményt hét év múlva, 1784-ben a budai várból Pestre telepítette, amely itt nyert immár végleges elhelyezést. Az oktatás nyelve a kezdetektől egészen 1844-ig, jóformán a reformkor végéig a latin volt, ami a soknemzetiségű hallgatóság számára közvetítő, semleges nyelvnek számított, ezt követően lett csak kötelező a német, de csak másfél évtizedre, 1860-ig. De térjünk vissza a kezdetekhez.

Amint említettük, 1769-ben megalakult az orvosi kar és ezen belül a kémiai-botánikai tanszék, melynek élére egy osztrák orvos került, a 30 éves *Winterl Jakab*. Őt tekinthetjük tehát hazánk első kémiaprofesszorának. Szorgalmas és precíz tudós hírében állt. Vesszőparipája az volt, hogy kísérletei alapján összekapcsolja a kémiát és az elektromosságot. Hogy ez a gondolat mennyire előremutató, azt jól jellemzi mai felfogásunk a legtöbb kémiai reakció hajtóerejéről, melyekben ellentétes töltésű ionok, vagy ellentétes résztöltést viselő molekulák kapcsolódnak össze.

A tévedésektől azonban ő sem volt mentes. Nagy híve volt a tudományellenes flogiszonelméletnek. Ez az elmélet az égési folyamatokat különös módon értelmezte. Eszerint az elemek égésekor, oxidációjakor az átalakuló elemből egy közelebről meg nem határozott anyag, a flogiszon távozik. Az elméletben hívőket nem zavarta, hogy az égés során például a foszfor súlya megnövekszik. Hogyan lehet ezt össze-

egyeztetni a flogiszon távozásával? Valahogy úgy, hogy a flogiszonnak negatív súlya van és a gravitáció hatására illan el. Ezt a kissé elmebajosnak tűnő ötletet a híres francia vegyész, Lavoisier cáfolta meg az 1780-as években, és ő mutatott rá az oxigén központi szerepére az égési folyamatokban. Winterl javára legyen mondván, hogy nem sokkal ezután már ő is elfogadta Lavoisier elméletét.

Winterl Jakab kémiai elemzésekkel is foglalkozott, és ebben túlzott precízége tévutakra vezetett. Mérései alapján úgy vélte, hogy kisebb-nagyobb mennyiségben minden vegyszerben megtalálható egy különleges hatású elem, melyet androniának nevezett el. Később sajnos kiderült, hogy ez az andronia nem más, mint a vizsgált anyag szennyezése.



Winterl Jakab

Még tíz év sem telt el, amikor Winterlnek Nagyszombatból Budára, majd Pestre kellett költöznie. Tanszéke a Hatvani utca és az Újvilág utca (azaz a mai Kossuth Lajos utca és a Semmelweis utca) sarkán levő kétemeletes bérház első emeletén kapott helyet, három szobában és két kis laboratóriumban. A laboratórium gőzei és gázai sok panaszt okoztak a második emeleten levő klinikai szobák betegeinek. Majd egy évszázadon át kellett a kémiának ilyen szűkös körülmények között tengetni.

Winterl negyven éven át tartó munkásságának fő érdeme az iskolaalapító tevé-

„A kémia nem történelem az ELTE-n” című előadás szerkesztett változata. Az előadás az „Alkimia ma” sorozat részeként 2011. március 18-án hangzott el az ELTE Kémiai Intézetében abból az alkalomból, hogy az intézmény 60 évvel ezelőtt vette fel Eötvös Loránd nevét.



kenység: az első magyar kémikusnemzedék tagjai – még mind orvosok – az ő tanítványai voltak, közöttük *Schuster János*, későbbi utóda a tanszéken, az ásványvízelemző *Nyulas Ferenc*, Erdély főorvosa, valamint *Kováts Mihály* sárospataki tanár, az első magyar kémiatankönyv írója. Ők alkották meg 1800 körül a magyar kémiai nyelvet, ők írtak először kémiai szöveget magyarul.

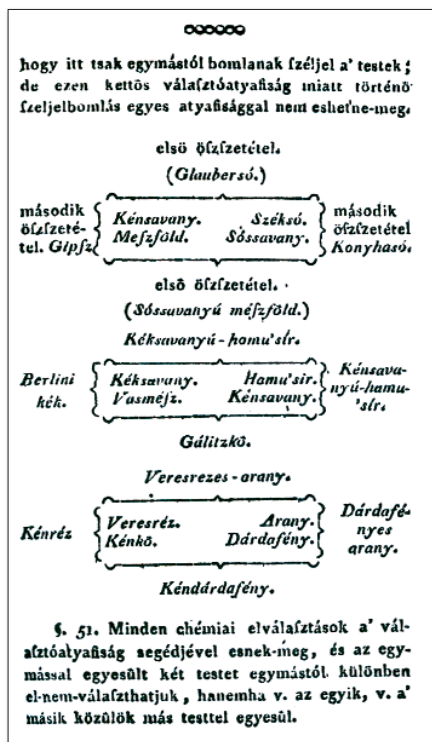
Nyulas a szaknyelvvvel kapcsolatos nehézségeket így jellemzi az *Erdélyi országos orvosi vizeknek bontásáról közönségesen* című, 1800-ban megjelent művének „Előbeszédében”: „Nemzetemnek olyan munkával kedveskedem, amely a maga nemében magyar nyelven a legelső. Nekem többet kellett e' munkámban a' tárgyszók kitételével, mint a' vizeknek bontásával küszködnöm. Még senki magyarul vizet nem bontott, a' Kémia is újság nyelvünkben, innen szükséges képpen sok új szót kellett csinálnom.” Nyulastól vagy kétszáz új szó származik, ezek egy részét ma is használjuk, ilyen például a folyadék, buborék, eszköz, kivonat, lombik, tégely, bontás, pezsgés, mások viszont kimentek a divatból, mint például a hevettyű (hőmérő), a fértek (térfogat), a bennének (töménység), az egyvelék (keverék).

Kováts is alkotott új szavakat, de ezek nem maradtak fenn. Nála titkáts a kémikus, víztárgy a hidrogén és savanyító az oxigén. Érdekes, hogy a kémia elődjének tekintett alkímiáról lesújtó véleménye volt. A *Chemia vagy természet titka* című, 1809-ben megjelent kémiakönyvében (amely egy elavult német könyv magyarra való átdolgozása) ez olvasható: „Az álchémiának semmi egyéb atyafisága nints a chemiával, hanem hogy a neveik hasonlóak. Az igaz, hogy az álchémia anyja a Chémiának, de mit tehet arról a' leány, hogy az anyja boldog.” Az akkor még virágzó vis vitalis elméletet Kováts viszont elfogadta: „A növényeknek és állatoknak testekben lévő elegyeket a' magok alkotórészeikből össze nem rakhatjuk. Ezt csak az életerővel bíró élőeszközök vihetik végbe.”

1809-ben bekövetkezett halála után Winterl Jakab örökét harminc évre korábbi adjunktusa, az orvostudományi fokozatot szerzett 32 éves Schuster János vette át. Akkoriban szétválasztották ugyan a botanikai és a kémiai tanszéket, de Schuster mindkét tárgykörben tartott előadásokat, mert társprofesszora, a híres Kitaibel Pál inkább csak utazásokkal és a botanikus kerttel foglalkozott. Nagyon jó tanár volt. Ő maga minden iránt érdeklődött, nagy szorgalommal figyelte a tudomány leg-

újabb eredményeit – élő enciklopédiának, járó-kelő könyvtárnak nevezték tanítványai –, de szinte semmit se alkotott a gyakorlati kémiában. Megírta viszont Pest város történetét, komponált egy kantátát és sajtó alá rendezte Winterl és Kitaibel műveit.

Schuster azért alkotott maradandót is: egy csoport szellemi vezetőjeként kézbe vette és véghezvitte a kémiai szaknyelv, főleg az elemek és a vegyületek idegen ne-



Egy lap Kováts Mihály kémiakönyvéből

vének magyarítását a nyelvújítás szellemében. A helyes logikával készült, de erőltetett hangzású „vegytani műnyelvet” kis átalakítással majd ötven éven át használták, főleg a gyógyszerészek. Mintául az ősi arany szó szolgált. Így lett a nátriumból silany, az antimonból dárdany, a báriumból súlyany, az ozmiumból szagany, a nikkeltől ingerlany és a rend kedvéért a rézből rézany, a vasból vasany. A kéneső a higany nevet kapta, és ez az egyetlen műszó, amely a mai napig megmaradt. Hogy miért éppen ez, erre a nyelvészek se tudnak választ adni, alighanem a véletlen műve. Úgy látszik, ez a nyelvújítások közös sorsa. Kosztolányi Dezső, a magyar nyelv művésze hiába ajánlotta az autóbusz helyett a társasgépkocsit, a telefon helyett a távbeszélőt, nem kellett. A mindennapi életben senki se mondja, hogy lemaradtam a társasgépkocsiról vagy beszereltem egy távbeszélő-készüléket. A mozgófénykép-színház viszont Heltai Jenő nyomán mozi-

ra redukálódott és megmaradt, népünk ugyanis szereti az ubi, pari, nagy, ovi, pisi, kaki típusú rövidítéseket. Schusterre visszatérve, nála a nemfémek nevét -ó, -ő végződés jellemezte: nitrogén-fojtó, klórzöldlő, bróm-bűzlő. A népszerű Schuster János alig múlt 60 éves, amikor 1839-ben meghalt. Nagy részvét mellett temették el, sírkövét Ferenczy István, a híres szobrász készítette. Ő volt az első kémikus tagja a Magyar Tudományos Akadémiának.

Schuster János halála után két évig nem nevezték ki utódát. Ezalatt adjunktusa, *Nendtvich Károly* tartotta az előadásokat, így joggal várta, hogy ő lesz a kémia professzora, de reformkori hazafias tevékenysége miatt nem őt, az alig 30 éves harcias ifjút, hanem a bécsi egyetem tanársegédét, *Sangaletti Edét* nevezték ki helyette. Pedig Sangaletti nem is tudott magyarul, rossz előadó volt, kutatóként semmit se alkotott és korábban sikertelenül pályázta meg a prágai katedrát. Előadásait német nyelven tartotta, ami 1844 óta kötelező volt az egyetemen. '48-ban rövid időre Nendtvich Károly került a helyére, de a szabadságharc bukása után Sangalettit visszahívták. A Bach-korszak idején a kémia osztrák mintára az orvoskarról átkerült a bölcsészeti karra. Ezzel lehetővé vált az önálló kémikusképzés, és vegyészetből is lehetett doktorátust szerezni. Emellett azonban az orvosok és gyógyszerészek kémiai oktatása még további száz évig a tanszék feladata maradt.

Bár Nendtvich a '48-as forradalom idején csak fél évig volt a pesti egyetem professzora, érdekes egyénisége miatt érdemes bővebben beszélni róla. Schuster János asszisztenseként azzal tette magát nevezetessé, hogy Bugát Pállal együtt tovább magyarította a kémiai szaknyelvet, elsősorban az elemek és a vegyületek elnevezésével foglalkozott. Abban a korban egyébként nagy divat volt a magyarítás, szívesebben ügyködtek vele, mint a laboratóriumi kutatással. Náluk minden elem neve -any, -enre végződött: így lett a cink horgany, a klór halvány, a bróm búzeny. A vegyületek nevében az oxidációs fokot az -any, -acs, -ag végződéssel jeleztek. Ez a fajta nyelvújítás annyira nyakatekert és túlhajtott volt, hogy a mai olvasó már nem is érti a szakmai szöveget.

Nendtvich 1845-ben megjelent, *Az életműtlen műipari vegytannak alapismeretei* című könyvében olvashatók ezek a sorok: „Ha hamvas kéklecs oldatán halványt hajtunk keresztül, akkor ez a hamvas kéklecs hamanyának részét elvonja hamhalvagot képezve. A kivált kékleny ellenben a vas-



kéklecsre szállván azzal vaskékleget képez...””, avagy: „Ha porrá tört kék gálicra étető kőnleget öntünk, eleinte zöldes por, mint aljas kénsavas rézeleg válik ki, mi alatt egyszersmind kénsavas kőnleget képeztetik.”

Előélete ellenére Nendtvich 1847-ben még is a kémia professzora lett, mégpedig az előző évben alapított József Ipartanoda, a Műegyetem ősenek kémiai tanszékén. Onnan hívták át '48 áprilisában a pesti egyetem katedrájára, az elzavart Sangaletti helyére. Akkor és ott végre magyar nyelven adhatott elő, ami boldogító nagy vívmány volt. Zárójelben említhető, hogy manapság meg éppen fordított a tendencia, az a kíváncsi, hogy minél több helyen és minél több alkalommal angol nyelven folyják az oktatás az egyetemen. Bizony változnak az idők! Sajnos a szabad magyar egyetem csak '48 őszéig működött, elsöpörte a szabadságharc vihára. Nendtvichnek is menekülnie kellett a Windischgrätz által '49 januárjában elfoglalt városból. A kinevezett egyetemi biztos rögtön megkezdte az igazolási eljárásokat. Viszont amikor Görgey áprilisban visszafoglalta a fővárost, ő is rögtön elrendelte az ellenkező előjelű igazolásokat. Haynau végleges győzelme után szolgálalkú biztosok kezdték újra vizsgálni, ki hogy viselkedett a „forradalmi kormányzat” idején. Az igazolóbizottságtól Nendtvich igen rossz minősítést kapott a besúgóí jelentések nyomán. Ezt írták róla: „Szóval és tettel nyíltan hirdette radikális demokrata, forradalmi nézeteit. A forradalmi kormány által történt kinevezése óta sem változtak a nézetei, s a hírhedt politikai klubokkal, melyekben mint szónok kiváló szerepet játszott, állandó összeköttetést tartott fenn. A bukott kormány menekülése után ő is eltűnt. Tehetséges, s éppen ezért annál veszélyesebb egyén.” Mégsem került bíróság elé, de elcsapták az egyetemi katedráról, melyet újra Sangaletti vett át. Egy évig nem kapott fizetést, megtarthatta viszont ipartanodai állását. Élete ezután 1892-ben bekövetkezett haláláig összefonódott ezzel az intézménnyel, amely 1871-től viselte a Műegyetem nevet.

Kémiai szempontból a '48-as eseményeknek volt egy másik érdekes epizódja is. Amikor az osztrák Sangalettit menesztették – miután gúnyosan közölte, hogy három nap alatt képtelen megtanulni magyarul –, szóba került a 30 esztendő *Görgey Artúr* kinevezése. Ő ifjúkorában tanár szeretett volna lenni, de apja katonai pályára kényszerítette. 1844-ben azonban kilépett a hadseregből és régi vágyát követ-

ve a prágai egyetemre ment kémiát tanulni, a híres Redtenbacher professzor tanítványa lett. Hamarosan önálló tudományos munkát végzett, a kókuszdió olajából nyerhető zsírsavakat vizsgálta precíz és fáradságos módszerekkel, hadvezérhez méltó haditerv szerint. Eredményeit 1848-ban egy előkelő német folyóirat, az *Annalen der Chemie und Pharmacie* 24 oldalas cikkben közölte *Ueber die festen, flüchtigen, fetten Säuren des Cocosnufsöles* címmel. Elszápanosítás után az alábbi zsírsavakat sikerült izolálnia: kapronsav, kaprilsav, kaprinsav, laurinsav (*Pichurimtalgsäure*) – ez utóbbit tiszta állapotban –, valamint feltehetően mirisztinsavat és palmitinsavat. Görgey még abban az évben megpályázta ugyan a pesti katedrát, de a professzori kinevezés helyett az ismert hadvezéri karrier várt rá.

1854-ben, Sangaletti nyugalomba vonulása után Bécsben az orvosi végzettségű, 34 éves *Wertheim Theodor* kapott kinevezést a pesti katedrára, ő előzőleg szerves kémiából Berlinben képezte magát, majd Görgeyhez hasonlóan Redtenbacher professzor prágai laboratóriumában dolgozott. A fokhagymából vízgőz-desztillációval nyert olajat vizsgálta és felfedezte benne az allil-szulfidot. Megfigyelte, hogy a különböző módon képezett származékokban nem változik a szén és a hidrogén százalékos aránya. Ebből arra következtetett, hogy a fokhagymaolajban lévő vegyületnek van egy olyan része, amelyik a reakciók során változatlanul kerül át egyik vegyületből a másikba: ezt (gyökelméleti értelemben) allilgyököknek nevezte el a fokhagyma latin nevéből (*Allium sativum*) kiindulva. Az allilgyök összegképletét ugyan helytelenül C_6H_5 formában adta meg, de ez a tévedés kortünetnek tekinthető. Munkáját 26 oldalas dolgozatban foglalta össze, mely 1844-ben jelent meg *Untersuchung des Knoblauchöls* címmel az *Annalen der Chemie und Pharmacie* hasábjain. Egy évvel később a mustárolajat vizsgálta és bizonyította az ebből izolált allil-izocianát rokonságát a fokhagymaolaj kén-tartalmú komponensével (*Ueber den Zusammenhang zwischen Senföl und Knoblauchöl*).

Jó tanár és jó szervező, bár lehetőségei igencsak sanyarúak voltak. „Az Újvilág utcai tanodában a tanterem 90 számozott hellyel bírt, a folyosókon pedig mindössze 15 dolgozó asztal volt felállítva” – írja egy korabeli tudósítás, noha Wertheim a saját szolgálati lakását is felajánlotta az egyetem céljaira. Nem csoda, ha ilyen körülmények között – ha már úgyis németül

megy az oktatás – az ambiciózusabb magyar ifjak az osztrák és a német egyetemeiket keresték fel, az agyelszívás bizony már akkor is működött. Wertheim sem tudott magyarul, ezért 1860-ban, amikor a magyar lett a tanítás hivatalos nyelve, lemondott pesti katedrájáról és a grazi egyetemen folytatta munkáját még négy éven át. Wertheimről nem sokat írnak a magyar lexikonok. A német Wikipedia viszont bőven foglalkozik személyével. Megírják például, hogy zsidó vallása miatt nem kellett a bécsi egyetemnek. De azt is leírják, hogy 1860-ban egyetemünkön latin lett az oktatás nyelve (!) és ezért mondott le Wertheim. Úgy látszik, az Internet és a Wikipédia se tévedhetetlen.

Az egyetemi kémia Than-korszaka

Wertheim távozása a bécsi döntéshozókat nehéz helyzetbe hozta. Az utódlás terén az idősebbek: Nendtvich, Irinyi és Görgey '48-as szereplésük miatt nem jöhettek számításba. Külföldön kezdtek hát keresgélni, és így esett a választás a bécsi egyetemen egy fiatal, mindössze 26 éves magántanár-ra, Than Károlyra, akit a Magyar Tudom-



Than Károly

mányos Akadémia nem sokkal aze-lőtt levelező tagjává választott. Kinevezését maga Wertheim és a heidelbergi Bunsen professzor is támogatta, nála Than korábban ösztöndíjasként dolgozott. Pedig Than Károlynak, a festő Than Mór öccsének is volt '48-as múltja. 15 éves korában Bem seregében harcolt és Vízaknánál meg is sebesült. A kiválasztás mindenestre jól sikerült. A magyarországi kémia hatalmas, fél évszázados fejlődése ugyanis mind a kutatásban, mind az oktatásban szorosan összefügg Than Károly személyével. Egyébként neki szerencséje is volt. A Bach-korszak után, a kiegyezéssel kezdődő konszolidált rendszerben, békés körülmények között, nagy iramban fejlődő gazdasági környezetben alkothatott, szervezhetett. Nagyot növekedett akkoriban a kémia társadalmi presztízse is. Kémikusokat igényeltek az új anyagvizsgáló intézmények, ipari laboratóriumok, egyetemek, főiskolák, kutatóállomások. Egyes középiskolákban tantárgy lett a kémia, szükség lett kémiantanárookra. A ké-



mikus lét önálló foglalkozássá és megélhetési formává vált hazánkban, és ez erősen növelte a Than által szervezett kémikus-képzés fontosságát. Than tanárként generációkat nevelt, mint kutató nemzetközi hírnévre tett szert, és szervezői munkájával számos máig élő kémiai létesítményt hozott létre. Gondoljunk csak a Természet-tudományi Társulatra, a Magyar Kémiai Folyóíratra és a Trefort-kerti Vegytani Intézetre, amelyről érdemes pár szót külön is ejteni.

A kémiaoktatás sanyarú helyzete miatt Than felvetette a Helytartó Tanácsban egy új, önálló kémiai intézet építésének gondolatát. Megoldás azonban csak a kiegyezés után született, Eötvös József kultusz-miniszter hathatós támogatásával. Íme, újra a történelem, a politika! Ekkor határozták el a Pesti Királyi Magyar Tudományegyetemen – ezt a nevet engedélyezte Ferenc József – önálló Vegytani Intézet megalapítását és felépítését. A heidelbergi egyetemen szerzett tapasztalatai alapján Than szervezte és vezette a munkát, ami három évig tartott. 1871-ben Than büszkén avatta fel megvalósult álmát. Az európai színvonalú új Vegytani Intézet az akkori fűvészkert telkén, a mai Trefort-kert közepén épült „... az országúttól [azaz a mai Múzeum körúttól] 70 méternyi távolságban és ennél fogva még a finomabb észleleteknél is az utcai közlekedés által okozott mindennemű rázkódásoktól meg van óvva. Oly intézetet kellett létesíteni, melyben 280–300 hallgató a kísérletekkel egybekapcsolt vegytani előadásokat látogathatja és egyidejűleg 70 gyakornok – kik közül mintegy 20 előbbre haladott, illetőleg önálló bűvárlatokkal foglalkozó – vehessen részt a vegytani gyakorlatokban. Az intézetben továbbá lehetővé kellett tenni, hogy benne kényelemmel, önálló tudományos bűvárlatok legyenek kivihetők, valamint, hogy a vegytani készítmények előállítására és nagyobb mérvszerinti vegyi műveletek is eszközölthessenek benne.” A későbbiek során, amikor a Trefort-kerti egyetemi létesítményeket betűjellel különböztették meg, a Vegytani Intézet a B épület megjelölést kapta.

A kémikusok gyakorlati képzését Than igen fontosnak tartotta: „A ki a vegyészet tanításával a szó mai értelmében foglalkozott, tudja, hogy ennek leglényegesebb részét a vegytani gyakorlatok képezik, mert eltekintve attól, hogy a gyakorlatok nélkülözhetetlenek mindazok számára, kik a vegytant bármilyen irányban alkalmazni akarják, meggyőződésem szerint a vegytani alapigazságok megértésére, néhány gon-

dosan eszközölt elemzés, és önállólag kivitt kísérlet többet használ, mint a legterjedelmesebb és legfényesebb szóbeli előadások használhatnak.”

A Vegytani Intézet bemutatásakor általánosságban is szót ejtett az egyetemek, a felsőoktatás fontosságáról: „A felsőbb tanítás újabb fejlődésének közelebbi vizsgálata tanúsítja, hogy ezen intézetek jelentősége a művelődésre Németországban igen nagy volt. Mert kétségtelen, hogy ezen intézetek közvetlenül magának a vegytannak haladására, továbbá az orvosi tudományra, a földművelésre, az iparra, valamint a nemzetgazdászatra határtalanul jótekonny befolyást gyakoroltak. De eltekintve ettől, legfőbb kultur jelentőségük abban áll, hogy a bűvárlati módszerek és a természettudományok tanítása terén egészen új, rendkívül sikerdús irányt alapítottak meg. E tevékenységnek igen lényeges része van abban, hogy a szabatos és tárgyilagos gondolkodás általánosan elterjedt, valamint abban, hogy a szerencsétlen előítéleteknek egész serege kiküszöböltetett, és hogy ezek helyébe a mai szabad társadalmi eszmék jutottak érvényre.”

A kor szokásainak megfelelően Than tevékenysége elvileg kiterjedt a kémia egészére. Az ő érdeklődése azonban főleg az analitika és a szervetlen kémia, később részben a fizikai kémia felé irányult, a szerves kémia viszont, amely akkoriban világszerte a kémia legdinamikusabban fejlődő ága volt, sajnálatosan kiszorult tudományos spektrumából, holott Bunsennél éppen ebből a tárgykörből doktorált. 115 publikációja az ő korában csúcsteljesítménynek számított. 1872-ben az Akadémia kémiai tankönyv írására kérte fel Thant. Több évtizedes munka után 1897–1898-ban jelent meg *A kísérleti chemia elemei* címet viselő mű első két részköte, mely az általános kémiát és az elemek leírását tartalmazta 879 oldalon. Ezt követte 1906-ban az 1009 oldalas második kötet, mely az anorganikus „törzsvegyületeket” tárgyalja. Ez az inkább kézikönyv, mint tankönyv minden téren valóban hűzágpótló volt. Than ezt írja: „... a munkát új és nem szokásos conceptio szerint írtam. ... E végből az alapfogalmak, tételek és törvények új formulázásával és ezeknek anyanyelvünkön való helyes és jól érthető kifejezésével sokáig kellett foglalkoznom, míg a kielégítő alakot megtaláltam.” Valóban Than alakította ki a túlzásoktól mentes, ma is élő magyar kémiai szaknyelvet.

Than Károly tanítványa, Ilosvay Lajos, későbbi műegyetemi professzor követte

mesterét a kémiai műszavak használatában. A *chemia alapjai* című könyvében (1881) egy érdekes szövegrész olvasható: „Könnyen meglehet, hogy most, mikor Franciaországnak megvan a maga galliuma, s ettől kedvet kapván a németországi chemikusok, megkeresték a germaniumot, az osztrákok az auriomot, majd a magyar chemikusok is egy hungariummal lepik meg a világot. A dologban egyáltalán nincs lehetetlenség.” Ez azért sajnós nem jött össze. A hungariumot ugyan nem találtuk meg, de Than azért felfedezett egy új vegyületet, a karbonil-szulfidot, igaz, hogy korábban, 1867-ben.

A Vegytani Intézet megnövekedett feladatai pár év múlva szükségessé tették, hogy az intézetben belül létrehozzák a II. sz. Kémiai Intézetet, és megosszák a feladatokat. Az új intézet professzora *Lengyel Béla*, Than Károly tíz évvel fiatalabb unokaöccse és asszisztense lett. Than az orvostanhallgatóknak, Lengyel a gyógyszerészhallgatóknak adott elő, a bölcsészhallgatók választhattak közöttük. Lengyel Béla kutatási területe hasonlított Thanéhoz, hazánkban ő foglalkozott elsőként radioaktív jelenségekkel. Népszerű oktató, jó előadó volt, kiváló szervezetlen kémiai tanácsadót írt, amely 1895-ben, egy évvel hamarabb jelent meg, mint Thané. Ez felkeltette Than féltékenységét, ami a plágium feltételezésén kívül abban is megnyilvánult, hogy a B épületi szép nagy előadótermet megtartotta magának és Lengyel Bélát a kisterembe száműzte, bár Lengyel volt a jobb előadó.

Lengyel Béla a kísérletező oktatás híve volt, ez kiderül egy 1882-ben megjelent előadási jegyzete előszavából, melyben ez olvasható: „Az alkalmazott vegytan feladata a vegytani ismeretek, tények alkalmazásában rejlik, egyszersmint módot nyújt arra, hogy a vegytannal foglalkozók, nem csak ismereteiket gyarapítsák, hanem hogy ennek kapcsán a kísérletek kivitelénél kelendő ügyességet sajátítsanak el. Ez okból inkább a practicus, mint a theoreticus oldalra kell a főbb súlyt fektetnünk.”

Érdekes, hogy 10 évvel a Vegytani Intézet felavatása után az időközben főiskolai rangot nyert Királyi József Műegyetem is építkezni kezdett a Trefort-kertben. 1882-re felépült az Eszterházy (a mai Puskin) utcában az F épület, és a korszerű laboratóriumokkal felszerelt tanszéket még az idős Nendtvich Károly vehette át. Amikor a Műegyetem a századforduló után a budai rakpartra költözött, a II. sz. Kémiai Intézet távozott a B épületből és elfoglalta a Trefort-kerti tágas F épületet. ●●●



Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

**FREUND MIHÁLY (1889. MÁJUS 25.) ÉS A HAZAI KŐOLAJIPAR FÖL-
LENDÜLÉSE.** A budapesti születésű fiatal vegyész-mérnök 1911-ben
szerez diplomát a Műegyetemen. Ezután Karlsruheban, Carl Eng-
ler professzor, az ásványolaj-tudomány egyik megalapítójának
írányítása alatt doktorál. Hazatérése után a kőolaj- és szénfel-



dolgozó-ipar szinte minden ágában
megfordul és visszavonulásáig meg-
szakítás nélkül munkálkodik ezen a
területen.

Munkásságának első meghatározó
állomása a Magyar Petróleumipari
Rt., ahol 10 éven át, 1914 és 1924 kö-
zött dolgozik. Igaz, az I. világháború
alatt frontszolgálatra kell vonulnia, de
csakhamar meghívják a bécsi had-
ügyminisztérium szintetikus gumi-
kísérleti állomására, amelynek 1916

és 1917 között vezetője lesz. A háború után az ásványolaj-termé-
kek választékának és alkalmazási területének bővítésén fárado-
zik, konzisztens kenőanyagok és ipari szappanok gyártására be-
vezetett technológiái úttörő munkának számítanak. Egyik legna-
gyobb horderejű újítása a cseppfolyósított földgáz szállítására
1934-ben tett javaslata, francia és német együttműködőkkel. Az
ő elgondolása nyomán vezetik be először hazánkban a pakura-
fűtést Siemens–Martin-kemencékben az akkori Weiss Manfréd
Acél- és Fémművek Rt.-nél, Csepelen.

A két háború közötti években a BME Technológia Tanszékével
és a Mezőgazdasági Géptan Tanszékkel működik együtt motor-
kenőolajok üzem közbeni vizsgálatában és adalékolásában, ismét
csak Magyarországon először. A II. világháború után ide, a Bu-
dapesti Műszaki Egyetemre kerül, mint magántanár. „Kőolaj és
termékei” címmel tart előadásokat, és az iparban dolgozó mér-
nökök továbbképzése is a feladatai közé tartozik. Az embargó be-
következtével a vegyipar és a kőolajipar önerőből való fejleszté-
se elkerülhetetlenné válik, amiben fontos támasz a hazai anyagi
és szellemi bázis. Freund előtérbe kerül, műszaki területen vállal
fontos vezető szerepet, mint a kőolaj-finomításban nagy tapasztalattal
rendelkező vegyész-mérnök. Saját erőből kell külföldön
már ismert technológiákat kidolgozni, új eljárásokat kifejleszteni.
Ez óriási hajtóerő egy hazai kutatási bázis megteremtéséhez.

1948-ban tehát új fejezet következik életében: a megalakuló
Magyar Ásványolaj- és Földgázkísérleti Intézet (MÁFKI) meg-
szervezésére kap megbízást. Az intézet kezdetben a Műszaki
Egyetemen, 1952-től kezdve Veszprémben működik egészen 1996-
os felszámolásáig. Több mint két évtizedig vezeti a MÁFKI-t,
amely az ásványolaj és földgáz feldolgozásában szinte minden te-
rületen kimagasló eredményeket ér el. A kedvező hatás rövidesen
az ipari termelésben, a szállításban, közlekedésben, de a lakos-
sági közszükségletek kielégítésében is megmutatkozik. Ennek a
munkának az eredménye például a hazai bitumenipar megalapí-
tása 1953-ban, amely a nagylengyeli kőolaj felhasználásán alapul.
Számos technológia bevezetése, üzemek tervezése és üzembe he-
lyezése, kenő- és adalékanyagok, szulfoklórozó eljárások alapuló
mosószeres kifejlesztése is az intézet nevéhez fűződik. Utóbbiak

gyártására az ország első petrokémiai üze-
me alakul 1952-ben,
amely gazdaságosabb technológiát jelent az akkoriban világszín-
vonalat képviselő, szintetikus normál szénhidrogéneket felhasználó
német eljárásnál. A teljesség igénye nélkül álljon még itt né-
hány jelentős munka: acetone előállítása acetilén parciális hidra-
tációjával, olefinből egy lépésben alkoholt eredményező oxo-szin-
tézisek, hidroformilezési reakciók stb.

Freund Mihályt az MTA 1948-ban levelező, 1954-ben rendes
tagjává választja, életútjának mérföldköveit számos kitünteté-
se jelenti. Több hazai és külföldi tudományos társaság tagja (pl. Ge-
sellschaft Deutscher Chemiker, American Chemical Society és a
Magyar Kémikusok Egyesülete, amelyben 70 éven át tevékeny-
kedett!). Közel 400 tudományos közlemény, itthoni és külföldi
szabadalmak fűződnek nevéhez, az általa vezetett MÁFKI 115 el-
járásra kap szabadalmi oltalmat. Iskolateremtő karakterét jelzi,
hogy tanítványai közül több egyetemi tanár, tudomány doktora
és két akadémikus kerül ki. 1984. június 12-én, Budapesten éri a
halál.

A MÁFKI 1996-ig működött, felszámolása után épületei a Ne-
hézvegyipari Kutató Intézetével együtt az akkor még Veszprémi,
ma Pannon Egyetem (PE) kezelésébe kerültek. A MÁFKI főépü-
lete ma a PE M épülete, itt található az egyetemi könyvtár, a
szomszédos NEVIKI pedig N épület néven tanszékeknek és elő-
adótermeknek ad otthont.

(Forrás: <http://www.kfki.hu/chemonet/osztaly/>, emlékbeszédek
gyűjteménye)

HERBERT C. BROWN (LONDON, 1912. MÁJUS 22.) – H.C.B. Ukrajnai
zsidó szülei a 20. század első évtizedének nagy bevándorlási hul-



lámával érkeznek Angliába, itt
születik fiuk, Herbert és nővé-
re, Ann. A család fő 1914-ben
úgy dönt, hogy csatlakozik a
tengerentúli rokonokhoz, így
rövidesen Chicagóba költöz-
nek, ekkor veszik fel az apai
nagyapa után a Brown nevet.
Még két húga születik, a né-
pes család egy darabig apja
asztalosként szerzett keresetéből él.

A 20-as évek gazdasági visszaesése miatt azonban az apa
csakhamar boltot nyit Chicago egyik fekete negyedében. Herbert
kiválóan teljesít az iskolában, végül 12 éves korában végez (csak
azért nem hamarabb, mert el akarja kerülni, hogy nővérével egy
osztályba kerüljön).

Az Englewood középiskolában folytatja, azonban apja beteg-
sége és halála miatt 1926-ban abbahagyja tanulmányait. A család
boltban dolgozik, de a munka annyira hidegen hagyja, hogy inkább
naphosszat olvas. Anyja ezt látva arra jut, hogy fiának
mégis inkább az iskolában a helye. 1929-ban újra felveszik, és
1930-ban végez is. (Erről az időszakról így ír: „Az Englewoodban
az iskolaújság humorrovátát vezettem és ezért országos díjat
nyertem. Sosem gyógyultam ki belőle.”)



Boltjukat eladják, szóba sem jöhet a továbbtanulás, munkát azonban nem talál. Így mégiscsak marad a főiskola, ahova elektromérnöknek jelentkeznek. Itt találkozik először a kémiával, amely egyből magába szippantja. Mindössze egy évet tölthet a főiskolán, amikor az – források hiányában – bezárja kapuit. A Lewis Institute levelező kurzusán tanul tovább, megélhetését cipőjavítással és -tisztítással biztosítja. Egy véletlen folytán értesül róla, hogy egy volt tanára, Dr. Cheronis hallgatókat keres laboratóriumába. Ide jelentkezik és nem telik bele sok idő, a csoport legjobbjá lesz. Ez a siker összehozza egy másik jeles tanulóval, Sarah Baylennel, későbbi feleségével, aki egyébként 1935-ben azt írja évkönyvébe, hogy Herbert egyszer még elnyeri a Nobel-díjat.

A University of Chicagóra jelentkezik, ahol nem kis meglepetésére kémia, fizika és matematika helyett történelemből, művészetből, zenéből és irodalomból kell felvételiznie. Végül is sikerrel veszi az akadályokat. Ebben az időben az egyetem lehetővé teszi, hogy a hallgatók minél gyorsabban végezzenek, így annyi kurzust vesz föl, amennyit csak bír, és az 1935/36-os tanévben megszerzi BS-diplomáját! Barátnőjétől ennek emlékére egy könyvet is kap, melynek címe: The Hydrides of Boron and Silicon (A bór és a szilícium hidridjei).

Nem jelentkezik doktorandusznak, minden vágya, hogy végre munkát találjon és családot alapítson. Közben azonban Julius Stieglitz, a híres szerves kémikus a lelkére beszél, így mégis marad az egyetemen. A Sarahtól kapott könyv hatására annyira megtetszik neki a bór-hidridek kémiája, hogy eszerint választ témavezetőt is, H. I. Schlesinger professzor személyében. (Ekkoriban mindössze két helyen lehetett bór-hidridet előállítani: Karlsruheban, Alfred Stock laboratóriumában, és Chicagóban, Schlesingernél.) 1937-ben összeházasodnak Sarahval, azonban évi 400 dolláros jövedelme túl kevés, hogy eltartsák magukat. Szerencsére 1938-ra elkészül észterek, aldehidek és ketonok bór-hidriddel való redukciójáról szóló PhD-téziseivel és ipari munkahely után néz. Bánatára ilyen nem talál, így marad Kharasch professzornál posztdoktori pozícióban, s a következő évben már kutatóasszisztens Schlesinger mellett. (Ahogy maga jellemezte helyzetét: azon ritka ké-

mikusok egyike, akik azért maradtak a kutatói pályán, mert nem találtak állást az iparban.) A háború elején megbízzák őket, hogy kísérletezzenek ki illékony, nem korrozív uránvegyületet. Ezt teljesítik, és előállítják az urán-borohidridet, csak hogy a bór-hidrid előállítását nagyon kis kapacitással tudják megoldani. Első ötletük, mely szerint lítium-hidridet reagáltatnak bór-trifluoriddal, nagyszerűen működik, de mégsem használhatják, mert a LiH más, háborús célokra kell. Ezután sikerül nátrium-trimetoxiborohidridet készíteniük, de addigra az urán-hexafluorid kezelésének problémáját már mások megoldják. Szerencsére azonban a hadseregnek szüksége van új hidrogén-előállítási lehetőségekre, így a nátrium-borohidriddel végzett kutatásaik folytatódhatnak. Ennek nyomán fedezik fel a vegyület különös stabilitását vízben és redukáló sajátságát ketonokkal szemben.

Négy év után, amikor kiderül, hogy Chicagóban nincs lehetősége előrelépni, a detroiti Wayne State Universityre megy, Neil Gordonhoz. 1946-ban meghosszabbítják a szerződését, de rá egy évre Henry B. Hass a Purdue Kémia Tanszékére hívja, hogy ott a szerves kémia tanára legyen. További karrierje ide kötődik. Telítetlen láncú észterek redukciója során felfedezi, hogy a nátrium-borohidrid, alumínium-klorid jelenlétében, készséggel reagál az olefin kettős kötással is. Ekkor már 1956-ot írunk. (Ezt a reakciót, amely átírta a szintetikus szerves kémiát, hidrobórlásnak nevezzük. Igaz, hogy hasonló alkil-boránt már 1862-ben előállítottak, csak hogy Brown fedezi fel a vegyületben rejlő szintetikus lehetőségeket. Herbert C. Brown szülei látnoki képességének tulajdonította, és mindig hangsúlyozta, hogy nevének kezdőbetűi épp a szén, a hidrogén és a bór vegyjeleiből adódnak össze: H. C. B.)

Az 1979-ben Nobel-díjjal elismert szerves bór-kémia mellett a sztérikus gátlás kvantitatív jellemzése fűződik nevéhez, de aromások alapvető tulajdonságait és szubsztitúciós reakcióit is kutatta, ezen a területen bevezette a δ^+ szubsztitúciós konstans fogalmát.

2004. december 19-én, szívinfarktusban hal meg.

(Források: 1. Chemical & Engineering News, December 21, 2004 (Obituary), 2. Biography of Herbert C. Brown at Purdue University, Dept. of Chemistry homepage)



Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy a

személyi jövedelemadójuk 1 százalékanak felajánlásából idén 1 088 943 forintot

utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásait, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget a „Kémia Nemzetközi Éve” programjai között is kiemelt hangsúlyt nyert kémiát népszerűsítő események, tehetséggondozó tevékenységek (Középiskolai Kémiai Lapok, Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, VII. Kémikus Diákszimpozium – Pécs, a 2011-ben harmadszor is megrendezett Varázslatos Kémia Tábor) egyes költségeire fordítottuk, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2011. évi SZJA bevallásakor – ér-

tékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező Nyilatkozat kitöltésével.

Felhívjuk figyelmüket, hogy akinek a bevallás pillanatában adótartozása van, az elveszíti az 1% felajánlásának a lehetőségét!

Az MKE adószáma: **19815819-2-41**

Terveink szerint 2012-ben az így befolyt összeget ismételtén a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a XIV. Országos Diákvegyész Napok, a Kémia-tanári Konferencia, valamint a 2012-ben negyedszer szervezendő Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

Továbbra is céljaink közé tartozik, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.



Új Eszter Dorottya

DE Kossuth Lajos Gyakorló Gimnáziuma

A „magyar Marie Curie”

Kelp Ilona életéről,
munkásságáról¹

Dolgozatomat egy kiemelkedő tehetségű asszonyról írom. Arról a máig példa nélküli magyar nőről, akit férjével együtt párhuzamba állíthatunk a Curie házaspárral – a „tudományos együttműködés(ban)” és tragikus eseményekkel terhes sorsukban is”.²

Kelp Ilona 1897. szeptember 25-én született Kassán. Amikor édesapja, Kelp Albert hirtelen elhunyt, ő még csak 15 éves volt. Ettől kezdve a Földművelésügyi Minisztériumban írkokoskodott, és magánúton fejezte be a gimnáziumot.

Saját pénzén végezte el az egyetemet is. 1923-ban kémia-fizika bölcsészdoktori címet szerzett. Doktori disszertációjának tárgya a bakelit összetétele és annak ruhagombként való alkalmazhatósága volt. Többen is felfigyeltek tehetségére, s hívták munkatársuknak. A Gyógynövénykísérleti Állomást választotta: „Állami segédvegyész volt a címem és az illóolajok kivonása és analízise volt a kijelölt munkaköröm.” Augusztin Béla professzor éppen akkor hívta meg az Állomásra kedves tanítványát, Kabay Jánost is. „1924. szept. 1. Szép verőfényes őszi napon, egyszerre jöttünk a Gyógynövénykísérleti Állomásra, két új vegyész... Szeptember mindig kedves időm volt, valami újat, valami szépet, valami kezdést éreztem benne mindig. S ezen a szeptemberi napon kezdődött az igazi életünk” – írta naplójában Ilona. Kabay János akkor már minden szabad idejében az ópiumalkaloidokkal, elsősorban a morfinnal foglalkozott. Bátyja hajdúnánási gyógyszer-tárában töltötte gyakornoki idejét, hogy az iskoláztatás költségét így is csökkentse. A ház mögötti kis laboratórium-

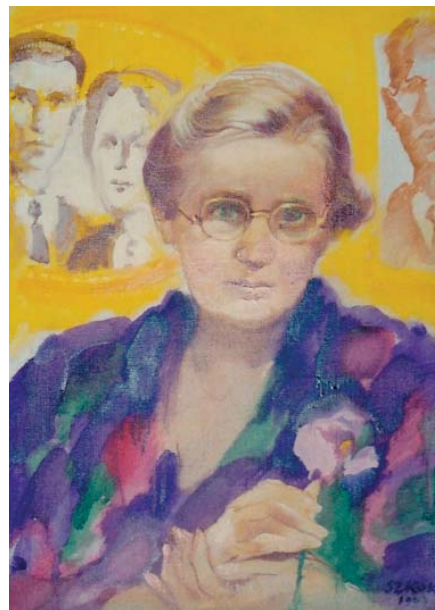
ban kísérletezett folyamatosan, s a kertben termesztett néhány mákból próbálta kivonni a morfin. Kimutatható sikerrel ugyan nem járt, de egyre jobban meg volt győződve elmélete igazságáról. A közös munka hamarosan meghozta első sikerüket is. A hajdúnánási patikában bepárolt extraktumokat Kabay János az intézetben megint feloldotta, és az ismételt kicsapást követően az elemzés végre igazolta a morfin jelenlétét.

Kabay módszere szerint a zöld máknövényt virágzás után aratták le, és a helyszínen vonták ki belőle a hatóanyagot, hogy a növényt ne kelljen szállítani. A kivonatot a gyárba szállították, s ott bepárlással nyers, pasztaszerű sűrítmenyt kaptak, amiből kioldották az alkaloidokat. A morfin-hidrokloridot átkristályosítással tisztították meg. Ezt nevezték zöld eljárásnak.

Bár az alkaloidok történetében már sikerült másoknak is máknövényből morfin előállítani, Kabay János és Kelp Ilona módszere volt az, ami a mai nagyüzemi eljárást lehetővé tette. Természetesen a kísérleti módszert tovább akarták fejleszteni, szerettek volna maguk morfin gyártani. Már kezdetben arra készültek, hogy ha Pesten nem sikerül a találmányt értékesíteni, akkor János szülőhelyén, Büdszentmihályon – a mai Tiszavasváriban – hoznak létre laboratóriumot és lehetőség szerint gyárat is.

1927. január 24-én az új vállalat megalakítására közgyűlést hívtak össze. Szabó Sándor ügyvéd lett az elnök, Kabay Péter az alelnök, Kabay János a műszaki igazgató. Így született meg az Alkaloida Vegyészeti Gyár Részvénytársaság.

Amikor a Kabay házaspár – az időközben megszületett – kis Jánossal Büdszentmihályra költözött, még nem készült el a gyári lakás. Egy földes szobájú, kemencés, petróleumlámpás parasztházat béreltek ki.



Kelp Ilona portréja a Magyar Vegyészeti Múzeumban (Szkok Iván alkotása)

Felesége nélkül Kabay János nem boldogulhatott volna a gyár üzembe állításával. Kelp Ilona úgy dolgozott ezekben a hónapokban, hogy már várandós volt második gyermekükkel, Ilonával. Az ő májusi születésekor a gyár is működni kezdett. Ezért Kelp Ilona az üzemet harmadik gyermeküknek nevezte. A kivont morfin nem fedezte a befektetett pénzt, és Kabay János többször próbált anyagi segítséget kérni az államtól. A támogatás csak 1930-ban érkezett meg – azután, hogy a Magyar Gyógyszerésztudományi Társaság előadójavételén Kabay János ismertette szabadalmát. A kiadások ellenőrzésére Wendler Miklóst rendelték ki. Ő meggyőzte a Kabay családot arról, hogy szükség van egy budapesti állandó képviselőre, amelyet ő szívesen vezetne. A Kabay testvérek ezt el is fogadták, nem sejtve, hogy egy pénzsóvár, ügyeskedő emberrel állnak szemben.

A morfin átalakítását kodeinné külföldi szabadalom védte, és az eljárás a rendkívül magas licenccím miatt elérhetetlen volt az Alkaloida számára. Kabayék munkához láttak: „Most újra laboratóriumban dolgozunk, mert meg kell oldanom a kodein kérdését. Nem elég morfin csinálni, a kodeint is ki kell dolgozni és bemu-
tatni... Rongyosak vagyunk tetőtől talpig,

¹ A Dr. Kónya Józsefné emlékpályázat nyertes dolgozatának jelentősen rövidített változata.

² Kovács Gergelyné, a Postamúzeum igazgatójának megállapítása.



a cipőnket cérnával kell bevarrni minden reggel, hogy felvehessük... De azért nincs semmi baj... Végre januárban a munka is célhoz ér. Megvan az első kodein (dimethylmorphin)."

Közben kicsépeelt mákszalmával is kísérletezni kezdtek. Bebizonyosodott, hogy a morfin csaknem változatlan összetételben megvan az érett mák tokjában is. Kabay János az újabb szabadalmat 1931-ben nyújtotta be, Eljárás ópiumalkaloidák előállítására címmel.

Az állam rákényszerítette a házaspárra a kodein gyártását annak ellenére, hogy szerintük az még nem volt gazdaságos.

Kelp Ilona egyre többet aggdott férje és nagyobbik gyermekük egészsége miatt. Mindkettejüknek kezelésre lett volna szükségük, de pénzük nem volt rá.

Később a mákszalma vasúti díjából engedményt kaptak, adó nélkül tudtak szeszt beszerezni, vámmentesen tudták lebonyolítani a kodeincserét. Az is kiderült, hogy Wendler becsapja a házaspárt: néhány szállítmányt kevesebb pénzért adott el – egy barátjának.

Augusztinnak köszönhetően a külföldi rendelések száma növekedett, így végre rendeződni látszottak a gyár és a család anyagi gondjai.

Kelp Ilona szinte teljesen egyedül is boldogult a gyártás folyamataival. Ráadásul egy nagyon fontos felfedezést tett. Észrevette, hogy jelentős eltérés van a különböző időben nyert hatóanyag-mennyiségekben, miközben a vegyszerek és a nyersanyag mennyisége azonos volt. Ekkor már az ország minden részéből érkezett a gyárba termény, így arra gondolt, hogy a növényekben vagy a talajminőségben kereshetők az okok. Heteken keresztül minden szállítmányt külön tároltak és aprítottak, és megjelölték a termelők neveivel. Megállapította, hogy a legmagasabb hozamot a Nyugat-Magyarország egyik részén termelt növények adják. Néhány nagyobb termelővel szerződést kötött a vetőmag szállítására, és attól kezdve az Alkaloida maga küldte a vetőmagot az ország minden területére. Így olyan egységes nyersanyaghoz jutottak, amelynek a legmagasabb volt az alkaloidtartalma.

A sok-sok nélkülözés, a fáradozás végre meghozhatta volna megérdemelt jutalmát. A svéd miniszter büdsszentmihályi látogatása után a sajtóban számos cikk jelent meg Jánosról, munkájáról, Ilona közreműködéséről és a gyárról. János fivére, Péter azonban egyre sértettebbnek érezte magát. János végül neki adta a gyár igazgatói posztját, ő az elnöki pozíciót tartot-

ta meg, és a családdal Pestre költözött. Mégsem voltak boldogok. Nem csupán azért, mert féltették a gyárat Péter hozzá nem értésétől, hanem mert hiányzott nekik az, amiért addig annyit dolgoztak.

János számításokat és tervrajzokat készített egy Lengyelországban létesítendő



A Kabay család 1934-ben

gyár részére, Ilona mindent megtett férje kikapcsolódása érdekében. Emellett laboratóriumot béreltek, ahol Ilona a gyárból szállított anyagokat ellenőrizhette, és a máknövény morfintartalmának meghatározására alkalmas készüléken dolgoztak.

Sokat tartózkodott Kabay János Lengyelországban is. A kutatói gyárból minden rendben elindult, miközben az amerikai szabadalmat is bejegyezték. Ilona Pesten egyedül folytatta a kutatást, az ellenőrzéseket.

1936. január 22-én Jánoson sérvműtétet hajtottak végre. Egy injekció nyomán azonban vérmérgezést kapott, amit az orvosok későn vettek észre. Egy héttel a műtét után meghalt.

Férje halála után Kelp Ilona befejezte a kutatómunkát. Eredményeit a „Morfin meghatározása mákszalmában, Kabay János módszerével” címmel tette közzé. Ezt a Népszövetség által kért analitikai eljárást Genfben is eljuttatta, s tovább nem akart a kutatással foglalkozni. 1936. március végén kezdte el naplója írását a gyermekei számára, hogy azok mindent pontosan tudhassanak édesapjuk munkájáról.

Wendler Miklós még ekkor is hasznolt a családból. Mivel a szabadalom Kelp Ilona és a gyermekek kezében

volt, feleségül kérte az özvegyet. Természetesen kosarat kapott. Többszöri próbálkozás után belátta, hogy más eszközökhöz kell nyúlnia. Egy morfinnal megrakott hajóval elszökött Magyarországról.

Eközben Budapestet bombázni kezdték. Egy bombatámadás alkalmával, amikor a család óvóhelyen húzta meg magát, a lakást találat érte. Hosszú, viszontagságos évek után 1950-ben Ausztráliába vándoroltak ki. A semmiből kezdtek új életet. Kelp Ilona varrással keresett pénzt, és ott is mindenben a tökéletességre törekedett. Addig például nem szólalt meg angolul, amíg jól meg nem tanulta a nyelvet. Később családjának szentelte minden percét, leginkább unokáiban lelte örömét. Nagy család volt számára, hogy nem lehetett jelen, amikor 1956-ban szobrot emeltek férje emlékére a gyárban. Harmincnégy évet élt Kelp Ilona a férje halála után, de soha nem hagyott fel gyászával.

1970. június 10-én hunyt el Sydney-ben. Hamvait Magyarországra szállították.

Ifj. Kabay János meghatottan emlékezett vissza édesanyja arcképvatató ünnepségére, amelyet a Vegyészeti Múzeumban tartottak 1997-ben.

Hálás vagyok Vigné Kis Ágnesnek, hogy lehetővé tette a találkozást ifj. Kabay Jánossal, s így „élő” emlékeket hallhattam erről a szakmai munkáját fiatalon abbahagyó, különleges tudással rendelkező aszszonyról. Köszönöm nekik, hogy a családi fotók közül sok, eddig publikálatlan képet kaptam meg. Fontosnak tartom, hogy a tudósok, jeles személyiségek magánéletéről, családjáról, a mindennapi életéről is hallhassunk. Hiszen ők is emberek, és munkájukat emberségükkel együtt értékelhetjük igazán.

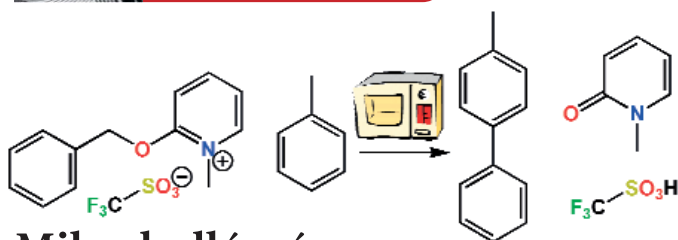
Úgy gondolom, hogy a Kelp Ilona naplójában található sorok életútjának ismeretében éppúgy vonatkoznak órá, mint férjére, Kabay Jánosra: „Kevés embernek adatik meg, hogy alkotni tudjon, hogy újat teremtsen, és ezzel megkönnyébbítse és megváltoztassa százak életét maga után.”

A szerző tanára:

Kovácsné Malatinszky Márta

IRODALOM

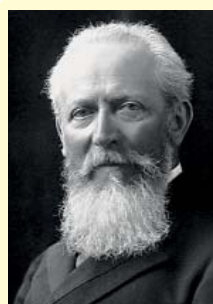
- Arcképvatató ünnepségek a Magyar Vegyészeti Múzeumban, Magyar Kémikusok Lapja (1997) 52. évf. 12. sz.
John J. Kabay: Kabay János magyar feltaláló élete, Alkaloida Vegyészeti Gyár Részvénytársaság; Tiszavasvári, 1992.
Kabay János – dokumentumfilm, Meduia-Arch Bt., 1996.
Kabay János naplója, 1924–1936.
Vigné Kis Ágnes – ifj. Kabay János: Kabay János, In: Esti beszélgetés – Magyar gyógyszerkutatók portréi, MTA Gyógyszerkémiai és Gyógyszer-technológiai Munkabizottsága; Budapest, 2005.



Mikrohullámú reakciógyorsítás

Mikrohullámú elektromágneses sugárzást már az 1980-as évek óta használnak kémiai reakciók elősegítésére, de az még mindig nincs teljesen tisztázva, hogy a módszer hogyan is hat. Elterjedt nézet, hogy az effektus pusztán a hatékony hőkéltésre korlátozódik, viszont egy amerikai kutatócsoport a közelmúltban arra talált bizonyítékot, hogy ennél azért több áll a háttérben. Oldószerként is használt toluolt benziloxi-piridínium triflourmetil-szulfonáttal vittek Friedel–Crafts benzilezési reakcióba. A tapasztalatok szerint a termékképződés sebessége mikrohullámmal sokkal nagyobb volt, mint amikor a mikrohullámú módszerben mért hőmérsékletre hagyományos módszerrel melegítették fel a mintát.

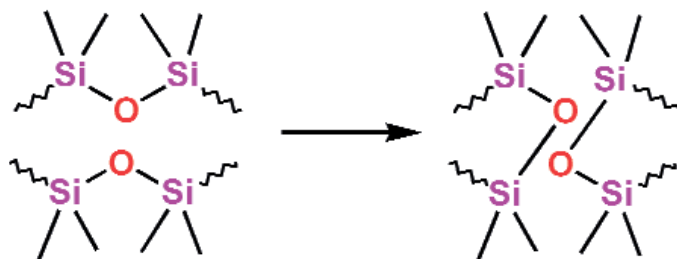
Chem. Sci. 3, 1240. (2012)



CENTENÁRIUM

Otto Wallach: Zur Kenntnis der Terpene und der ätherischen Öle. *Justus Liebigs Annalen der Chemie*, Vol. 388, pp. 49–62. (1912. május)

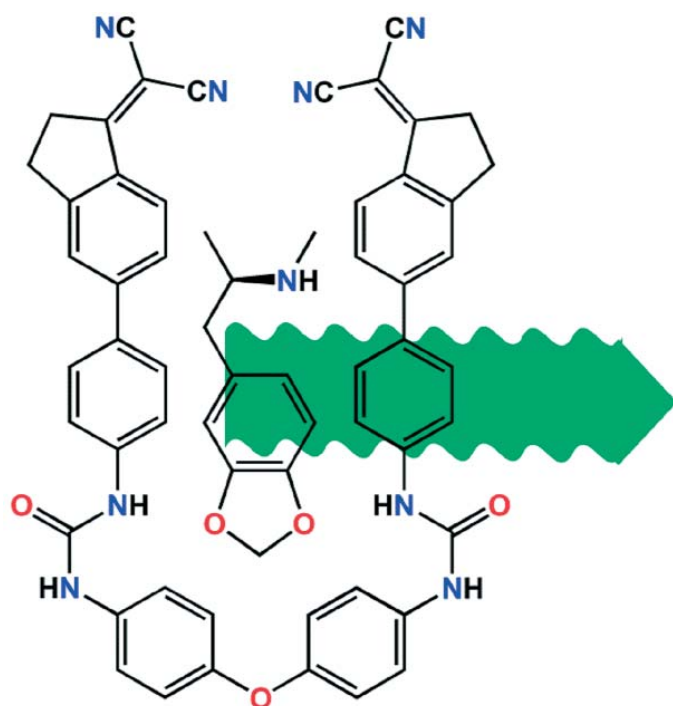
Otto Wallach (1847–1931) német kémikus volt. Göttingenben szerzett doktori fokozatot, tudományos pályafutásának jelentős részét is itt töltötte. 1910-ben Nobel-díjat kapott az aliklusos szerves vegyületek kutatásában elért eredményeiért.



Öngyógyító polimer a múltból

Amerikai kutatók egy 1954-ben előállított sziloxán típusú polimer öngyógyító sajátosságaira derítettek fényt a közelmúltban. Oktametil-ciklotetrasziloxánt és bisz(heptametil-ciklotetrasziloxanil)-etánt 80:1 mólarányban tartalmazó elegy 90 °C-on véghezvitt anionos polimerizációjával olyan makromolekulákat kaptak, amelyek aktív szilanolat végcsoportokat is tartalmaztak. Amikor egy késsel megvágott polimerdarabot 90 °C-ra melegítettek, elérték, hogy a sérülés teljesen megszűnjön.

J. Am. Chem. Soc. 134, 2024. (2012)

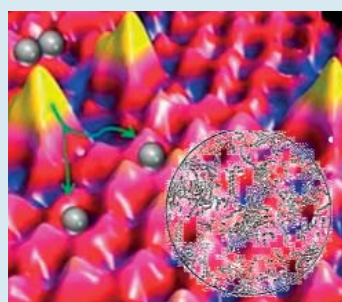


Turbósított Ecstasy-detektor

Spanyol tudósok az Ecstasy hatóanyaga, az MDMA (3,4-metiléndioxi-metamfetamin) gyors kimutatására dolgoztak ki eljárást. A módszer lényege, hogy az MDMA egy fluoreszcens csoporttal kapcsolt dialkilkarbamid-származékkal reagáltatva zöld színnel (517 nm) fluoreszkáló származékot képez. A fluoreszcencia ki-váltásához elég egy hordozható UV-lámpa is. Ha a kibocsátott fényt pusztán szemmel figyelik meg, az MDMA-t ugyan nem lehet más, hasonló szerkezetű primer és szekunder aminoktól – például az efedrintől vagy az amfetamintól – megkülönböztetni, a fluoreszcencia-spektrumok főkomponens-analízise révén viszont ez is gyorsan megoldható.

Chem. Commun. 48, 2994. (2012)

Baktériumgyilkos kristályok



A lítium-niobát (LiNbO₃) és lítium-tantalát (LiTaO₃) kristályai a jövőben akár fontos fertőtlenítőszeresek is lehetnek. A két, vízben nem oldódó, könnyen előállítható, nem mérgező anyag piroelektromos sajátosságú, vagyis a környezet hőjét elektromos energiává képes alakítani. Német tudósok a közelmúltban mutatták ki azt,

hogy a lítium-niobát és a lítium-tantalát nanoméretű részecskéi szobahőmérsékleten nagy hatékonysággal pusztítják el az *Escherichia coli* baktériumokat. A hatás valószínű mechanizmusa az, hogy a piroelektromos, nanoméretű kristályok felületén a reakcióképes, oxigéntartalmú részecskék felhalmozódhatnak.

J. Phys. Chem. C 116, 5383. (2012)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

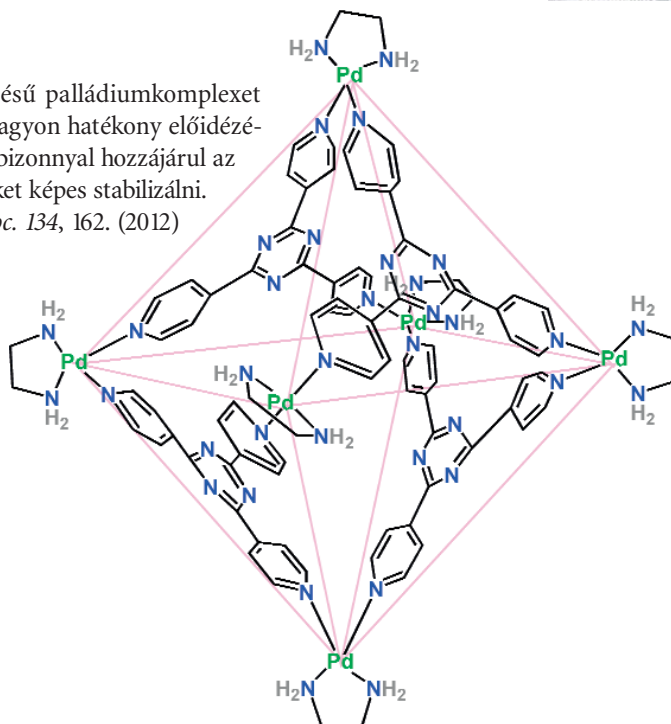
Az ábrán látható, M_6L_4 típusú, ellenionok nélkül 12 pozitív töltésű palládiumkomplexet ($C_{84}H_{96}N_{36}Pd_6(NO_3)_{12}$) vizes közegben Knoevenagel-kondenzáció nagyon hatékony előidézéséhez használták. Az erős katalitikus hatás kialakításához minden bizonnyal hozzájárul az oktaédes kalitka kationos jellege is, amely az anionos köztterméket képes stabilizálni.

J. Am. Chem. Soc. 134, 162. (2012)



APRÓSÁG

Egy ellene indított bírósági eljárásban a PepsiCo cég tudományos bizonyítékot mutatott be arra, hogy az általuk gyártott Mountain Dew üdítőital néhány nap alatt felold egy egeret.

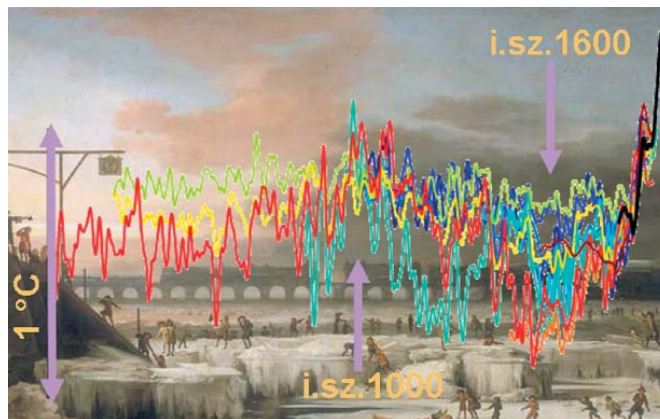


Avogadro-állandóbb

Kanadai kémiai metrológusok az Avogadro-állandó tervezett új definíciójához kapcsolódó mérési módszert dolgoztak ki, amely minden bizonnyal hamarosan maga után vonja a Planck-állandó és a kilogramm egységének újradefiniálását is. Az Avogadro-állandó új definíciója a szilícium-28 egykristályait használja majd, így ezek krisztallográfiai paramétereinek, valamint sűrűségének nagyon pontos ismerete szükséges a metrológusok számára. A szilícium-28 új mérőszorozattal megállapított relatív atomtömege 27,97696839(24), amelyből az Avogadro-állandóra következő érték $6,02214040(19) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Anal. Chem. 84, 2327. (2012)

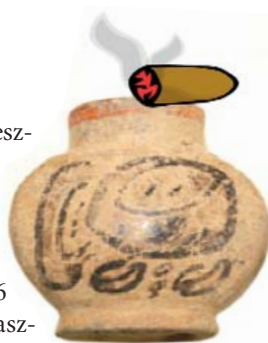
$6,02214040 \cdot 10^{23}$



Maja dohány

Az Amerikai Egyesült Államok Kongresszusi Könyvtárának gyűjteményében, egy i. sz. 700 körül készített maja agyagedény belsejében tömegspektrometriás módszerrel nikotinyomokat sikerült kimutatni, és ezzel ez a kb. 6 cm átmérőjű kis téglya lett a dohányhasználat legidősebb fizikai bizonyítéka. Habár a tárgy külsején lévő ábrák alapján elvileg következtetni lehetett volna a tartalomra, korábbi esetekben az ilyen feliratok és képek gyakran megtévesztették a régészeket: mindössze egyetlen példa volt ismeretes arra, hogy egy maja edény külső rajzán tényleg az volt, amit a belső rész kémiai elemzésével végül sikerült kimutatni. A nikotin detektálásához szerencse is kellett: ez az alkaloid nem feltétlenül stabil 13 évszázadon keresztül, s az elemzést azt is megkönnyítette, hogy a környezetében nem volt jelentős mennyiségű vas(III)-oxid.

Rapid Commun. Mass Spectrom. 26, 403. (2012)



TÚL A KÉMIÁN

Vulkanikus kis jégkorszak

A Kis jégkorszak néven ismert lehűlési periódus a 14. században kezdődött és a 19. században ért véget. Ebben az időszakban Nyugat-Európában az átlagos hőmérséklet 1–2 °C-kal alacsonyabb volt a korábnál. Éghajlattudósok már régóta vitatkoztak azon, hogy ezt a jelenséget a Nap energiakibocsátásának csökkenése vagy a földi vulkáni tevékenység okozta-e. A kanadai Baffin-öbölben a közelmúltban kiolvadó növényi maradványok radiokarbon kormeghatározása azt mutatja, hogy egy 1275 és 1300 közötti szűk időintervallumban rengeteg növény pusztult el. Ebben az időszakban a trópusi vidékeken négy hatalmas vulkánkitörés is volt. Egy-egy ilyen esemény légkört hűtő hatása általában mindössze néhány évre szól, de a négy kitörés együttese a légkörmodellek szerint az Atlanti-óceán északi részén már olyan mértékben megváltoztathatta az áramlásokat, hogy az akár több évszázados lehűlést is eredményezhetett.

Geophys. Res. Lett. 39, L02708. (2012)

Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg@dragon.klte.hu.



Köszöntő egy barát, kolléga, Liptay György születésnapján

Kedves Gyuri!

A nullával végződő születésnapok, ötvenről kezdve különösen, egyre jobban elgondolkoztatnak mindnyájunkat, mind a múlton, mind a jelenen. Az ünnepelt, a család, a barátok és a kollégák együtt és külön is hátránéznak és felsóhajtanak: Te jó Isten, hogy elszaladt az idő!



„Tempora mutantur et nos mutamur in illis” – mondták már a rómaiak, és van is benne valami. Hogy változásaink jók voltak-e, nem könnyű eldönteni, mert a legjobb tettünk is sérthet valakit. Ehhez az önvizsgálatot – „hogyan sáfárcodtam...” – magunknak kell elvégeznünk, de jó érzés, ha a környezetünk szeretetével, elismerésével és megbecsülésével segít ebben. Ettől indítva, mint az Egyesület volt elnöke, a nyolcadik X elérésekor köszöntelek és megköszönöm azt a támogatást, amit bölcsen és megfontoltan Tőled kaptam tisztségem tizenegy éve alatt.

Életre szóló kölcsönös tiszteleten és megbecsülésen alapuló barátságunk 1966 tavaszán kezdődött, amikor hátunk mögött a Colosseummal, a Forum bejáratánál álló Titus diadalívénél találkoztunk. Találkoztunk mi, fiatal magyarok, pályakezdő kutató és oktató, ami akkoriban igazán hihetetlen véletlennek volt tekint-

hető! Ez az élmény egy életre szóló kapcsolatot szült, és az ebből származó bizalom volt az, amit mindenkor éreztem, amikor elnöki éveim nehézségeivel meg kellett küzdenem.

Végül, a megtiszteléseket halmozva, nemrég köszönhettem 100 éves másodmesteremet, Sasvári Kálmánt. Ez a csodálatos esemény felbátorít, hogy azt kívánjam Neked: Vigyázz magadra és törekedjél arra, hogy egészségben te is megérd a tizedik X-et. Isten éltesse!

Igaz barátsággal,
Kálmán Alajos

HÍREK AZ IPARBÓL

Innovációs Nagydíjat nyert az Egis

Húsz évvel ezelőtt indult útjára a Magyar Innovációs Nagydíj pályázat. Az Egis első innovációs díját 1992-ben nyerte nifedipin hatóanyagú kardiiovaszkuláris készítménycsaládjával. A március 30-ai jubileumi Magyar Innovációs Nagydíj átadási ünnepségen a gyógyszergyár vezérigazgatója, Hodász István az „Egitromb® 75 mg



filmtabletta a vérrögződés megelőzésére” című pályázatáért a legnagyobb elismerést, az Innovációs Nagydíjat vehette át.

Az Egis Gyógyszergyár Nyrt. generikus clopidogrel-hidrogén-szulfát hatóanyag-tartalmú filmtab-

lettája a vérrögződés következtében kialakuló klinikai állapotok megelőzésére szolgáló gyógyszer, amellyel miokardiális infarktuson, isémiás szélütésen átesett betegeket és perifériás vérőrbetegségben, akut koronária szindrómában, pitvarfibrillációban szenvedőket gyógyítanak. E betegek ellátási színvonalának javítása – amelybe a vérrögződés kockázatának csökkentése is beletartozik – népegészségügyi érdek.

Az Egis független gyártóeljárást dolgozott ki a racém clopidogrel előállítására, amely a clopidogrel-hidrogén-szulfát hatóanyag kulcsintermedierje. Az új megoldásra 2000-ben szabadalmi oltalmat kapott. Ez az eljárás tette lehetővé a készítmény piacra hozatalát az originátor készítményét védő szabadalmak lejáratá előtt.

Az Egis gyártóeljárást dolgozott ki a Form I polimorf clopidogrel-hidrogén-szulfát hatóanyag előállítására, amire 2003-ban magyar és európai szabadalmat is kapott. Ez az innováció az egyik alapfeltétele a megfelelő stabilitású készítménynek.

A filmtabletták gyógyszer-technológiai fejlesztése során a hatóanyag tulajdonságaiból eredő nehézségeket innovatív megoldásokkal sikerült megoldani. A készítmény nagyfokú stabilitásához vezető összetételét és a környezetbarát gyártási technológiát két szabadalmuk – 2004-től magyar és 2006-tól Magyarországra is érvényesített európai szabadalom – védi.

Az Egis Gyógyszergyár Nyrt. 2009 óta 17 országban vezette be saját fejlesztésű clopidogrel készítményét, melyből 2011 végéig összesen 3631 millió forint kumulált árbevételt ért el. A gyógyszer a hazai piacon összességében 993 millió forint eladást ért el a 2009-es bevezetése óta, és ezalatt az originális készítményhez képest 478 millió forint megtakarítást hozott az Országos Egészségbiztosítási Pénztárnak.

Mészáros Mariann

HIRDETÉS



MEGHÍVÓ

Az Egis Gyógyszergyár Nyrt. és a Szegedi Tudományegyetem tisztelettel meghívja Önt a

Nemzeti Technológia Program keretében megvalósuló „Pszichiátriai kórképekben és az azokat kísérő kognitív deficit terápiájában használható gyógyszerjelölt fejlesztése” című kutatási projekt szakmai konferenciájára.

Időpont: 2012. június 1. 10–16 óra

Helyszín: Larus Étterem és Rendezvényközpont (Budapest XII., Csörsz u. 18.)

A konferencia programja:

- A projekt bemutatása
- A kutatási munkák ismertetése
- Az eredmények hasznosítása

A rendezvényen való részvétel térítésmentes. Kérjük, részvételi szándékát 2012. május 20-ig szíveskedjen jelezni a pap.anasztazia@egis.hu e-mail-címre. Mivel limitált részvételi hely áll rendelkezésre, ezért a jelentkezés sorrendjében tudjuk a részvételt biztosítani. Megértésüket köszönjük.

Nemzeti Fejlesztési Ügynökség
www.ugyeshyterterv.gov.hu



A projekt a Kutatási és Technológiai Innovációs Alap támogatásával valósul meg.



Kiszorul a hazai piacról az Egis innováció nagydíjas készítménye

Hodász István, az Egis Gyógyszergyár Nyrt. vezérigazgatója a díj átvételét követő napon megjelent Magyar Nemzetben elmondta: az Egis clopidogrel hatóanyagú tablettája azért különleges, mert szerves oldószer nélkül készült, laktózmentes, tehát a tejcukor-érzékeny betegeknek is alkalmazható. Lejárati ideje is hosszabb, mint a hasonló készítményeké. A gyógyszerrel 17 országban összesen 3,6 milliárd forintos forgalmat ért el az Egis két év alatt. A szert körülbelül 30 ezer magyar – többek között infarktuson vagy agyvérzésen átesett – szívbeteg használta tavaly.

Április elsejétől azonban csökken, júliustól pedig végleg megszűnik Magyarországon az ártámogatása. Ennek oka, hogy egy jogszabály szerint az Országos Egészségbiztosítási Pénztár megvonja azoknak a gyógyszereknek a társadalombiztosítási (tb-) támogatását, amelyek 30 százalékkal többbe kerülnek az adott csoporton belüli, azonos hatóanyagú – legolcsóbb és valós forgalommal rendelkező – referenciakészítménynél. A korábbi 1431 forintos térítési díjú gyógyszerért áprilistól 2095 forintot kell fizetniük a betegeknek, júliustól – a tb-támogatás törlésétől – pedig 2776-ot.

A clopidogrel árát eddig már 48 százalékkal csökkentettük – mondta Hodász István. – Ahhoz, hogy megtarthassuk a tb-támogatást, újabb 48 százalékos árcsökkentést kellett volna végrehajtunk. A hazai adó- és járuléktérhek mellett viszont ezt a terméket ezen az áron nem lehet Magyarországon gazdaságosan előállítani, ezért úgy döntöttünk, a készítményt nem forgalmazzuk tovább a hazai piacon.

2011 októbere óta további két másik, innováció díjas Egis-termék is elveszítette tb-támogatását s ezzel magyar piacát is.

Vegyipari mozaik

Richter. Az üzemi profitvárakozások csaknem dupláját hozta 2011. negyedik negyedévben a Richter. A gyorsjelentés legfontosabb pontjai voltak: erőteljes növekedés az orosz és egyéb FÁK-piacokon; az USA piaci jól teljesítettek, a mélypont 2011-ben talán már megvolt; Kelet-Európában szigorodó szabályozások láthatók; az orosz és a román nagykereskedő cég és a Hungaropharma után is jelentős értékesítést számolt el a Richter; a cash-állomány ismét jelentősen emelkedett.

A két legnagyobb költségelem, az értékesítési és a K+F egyaránt jelentősen emelkedett. Előbbi esetében a nyugat-európai és a FÁK értékesítési hálózat jelentős bővítése, valamint a fokozott promóciós tevékenység volt az ok, utóbbiért pedig a Foresttel együtt végzett klinikai vizsgálat, valamint a PregLem és a Richter-Helm Biologic kutatási ráfordításai voltak a felelősek.

A gyógyszer-gazdaságossági törvény által előírt belföldi orvoslátogatói regisztrációs díj címén 639 MFt-ot számolt el a Richter 2011 első és negyedik negyedévében. A második és harmadik negyedévre jutó regisztrációs díjat teljes egészében visszaírta a Richter a K+F kiadásaira való tekintettel. A 12%-os befizetési kötelezettség (ami 2011. július 1-jétől 20%-ra nőtt) 1 mrd Ft-ot tett ki 2011-ben. A második és harmadik negyedévre jutó kötelezettséget visszaírta a cég, mivel a 2011. július 1-jén hatályossá vált törvénymódosítás értelmében a Richter a K+F kiadásai alapján a

2010-ben teljesített befizetésekből 100%-os engedményre jogosult. Az Esmya pozitív fejleményei miatt a PregLem volt tulajdonosai felé fennálló kötelezettség fizetésének valószínűsége növekedett, amit 5 mrd Ft egyéb költségként könyveltek le. Ennek a deviza-értékteljesítő hatása a pénzügyi eredményben jelent meg. A nettó profitot rontotta a Hungaropharma, ahol a lejárt követelésekre elszámolt értékesítésből a társaságra jutó hányadot, 1,9 mrd Ft-ot számolt el a Richter. A mérlegben az ingatlanok értékének növekedését az okozta, hogy a társaság aktiválta a debreceni biotechnológiai üzemet.

2011. június 14-én az Európai Befektetési Bank és a Richter 150 m euró összegű hitelkeret szerződést írt alá a központi idegrendszeri originális kutatások és a bioszimiláris fejlesztési programok finanszírozására. A hitel első részletét, 50 m eurót december 21-én lehívta a társaság, ami a következő időszakban a kamatfizetést növeli majd. A teljes bevétel növekedése több tényező miatt is torzít, hiszen a bázis időszakban a Grünenthal még nem szerepelt, a forint jelentős mértékben gyengült minden releváns devizával szemben. Az euróban kimutatott számok esetében a Grünenthal jelentős növekedést generált az EU piacain az előző negyedévihez képest is, az éves bevétel a várt 45 m euróval szemben 52,5 m euró lett. Szintén igen jó számokat láthattunk a FÁK piacain. Az exportra pozitív hatást gyakorolt az USA is, ahol ugyan a bázishoz képest 28%-os euróban mért csökkenés volt tapasztalható. Kelet-Európában érdemi változások nem történtek a forgalomban, a szabályozásban azonban igen, hiszen: 2012. január 1-jei hatállyal új gyógyszertervezést vezettek be Lengyelországban, ami további szigorítást jelent a gyógyszergyártók számára; 2011 decemberében új gyógyszertervezést vezettek be Csehországban és Szlovákiában; az egészségügyi kiadások csökkentésére a balti államokban is megmozgató intézkedéseket fogadtak el; a román piacon 2011. október 1-jén újabb támogatás-visszafizetési szabályozás lépett életbe a részben vagy egészben támogatott termékekre vonatkozóan, mely a társadalombiztosítási túlköltséget piaci részesedés alapján rója ki a gyártókra. (portfolio)



Egis. Poroszlai Csaba, az Egis pénzügyi igazgatója a társaság gyorsjelentést követő elemzői és sajtótájékoztatóján csökkentette az idei évre vonatkozó bevételi előrejelzését.

A hazai piacon negatív trend látható, s nem kizárt, hogy további komoly árcsökkenés lesz az idei évben. A késztermék- és hatóanyagexport nem a lezárt negyedévre koncentrálódott, de a következő negyedévekben kisebb visszaépülés várható.

A jelenlegi árfolyam fennmaradása esetén a bruttó fedezeti szint kismértékben meghaladhatja a tavalyit. Határidős ügyleteket csak rubelre köt a társaság forinttal szemben, a következő 6 hónapra vonatkozóan. A K+F beruházások jelentősek lesznek (a tavalyihoz hasonló 15 mrd Ft összberuházás várható éves szinten) az idei évben, egy 5000 nm-es kutató- és analitikai központot épít az Egis. A K+F költségek növekedésével számol a cég a negyedik negyedéves csökkenés ellenére. A költségkontroll a hazai megszorítások miatt lépett életbe. A cash-flow és így a készpénz-állomány csökkenése annak volt köszönhető, hogy a beruházások nagy része nyáron zajlik az Egisnél, a szállítók kifizetése pedig a negyedik negyedévben történt meg. A következő negyedévekben így erre a hatásra nem kell számítani.

Tervek. A társaság vezetése a hazai és a kelet-európai piacokon csökkentette a bevételi előrejelzését, amire elsősorban a kedvezőtlen szabályozói változások következtében került sor. (portfolio)



Szent-Györgyi Albertre emlékeznek a tudományos világ. Valóban egyedülálló dolog történt hetvenöt évvel ezelőtt, mondta Pálincás József a Szent-Györgyi Albert Nobel-díjának 75. évfordulója alkalmából rendezett konferencia megnyitóján.



Szent-Györgyi Albert 1937-ben a biológiai égeszfolyamatok, különösen a C-vitamin és a fűmár-sav-katalízis szerepének terén tett felfedezéseieért kapta meg az orvosi-élettani Nobel-díjat, egyetlen olyan magyar tudósként, aki Magyarországon végzett tudományos tevékenysége elismeréséül érdemelte ki a kitüntetést.

A márciusi szegedi konferenciára a világ minden tájáról érkeztek kutatók. A közel ezer vendég közül a legnagyobb figyelem annak a kilenc Nobel-díjas tudósnak jutott, akik elfogadták a szervezők meghívását: Andrew W. Schally 1977-ben, Bert Sakmann 1991-ben, Eric Wieschaus 1995-ben, Peter C. Doherty 1996-ban, Tim Hunt 2001-ben orvosi-élettani Nobel-díjat; Ada E. Yonath 2009-ben, Aaron Ciechanover 2004-ben, John E. Walker 1997-ben, Robert Huber pedig 1988-ban kémiai Nobel-díjat kapott. A Nobel-díjas kutatók az előadások mellett személyesen is találkoztak egyetemi hallgatókkal és középiskolásokkal. (MTA)

Banai Andre összeállítása

.....

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Irinny János Középiskolai Kémiaverseny

2012. május 11–13. Miskolci Egyetem (Miskolc-Egyetemváros)
Versenykiírás, illetve a versennyel kapcsolatos információk:
www.irinyiverseny.mke.org.hu

Magyar Kémikusok Egyesülete Küldöttközgyűlés

2012. május 18. 10:00
Budapesti Fasori Evangélikus Gimnázium (Városligeti fasor 17–21.)
Megközelítés: az M1 földalatti Bajza utcai megállójától a Bajza utcán besétálva a Benczúr utca irányába a 3. keresztutca a Városligeti fasor.
A regisztráció 9:00-tól kezdődik.
A közgyűlési dokumentumok honlapunkról letölthetők.
A küldötteket, szakosztályok, szakcsoportok, területi szervezetek, munkahelyi csoportok vezetőit és minden egyesületi tagtársunkat szeretettel várjuk.

Biztonságtechnika Továbbképző Szeminárium

2012. május 23–25.
Hotel Magistern (Siófok, Beszédes József sétány 72.)
Online jelentkezés: www.biztonsagtechnika.mke.org.hu
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kortvélyessy Eszter,
eszter.kortvelyessy@mke.org.hu

Precarb-12 Surface Chemistry and Performance of Carbon Materials

2012. június 15–16.

Magyar Tudományos Akadémia (Budapest, Széchenyi tér 9.)
Online jelentkezés: <http://www.precarbon-budapest2012.mke.org.hu/>
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, precarbon2012@mke.org.hu

CAC2012 XIII. Chemometrics in Analytical Chemistry

2012. június 25–29. ELTE
(Budapest, Pázmány P. stny 1/A)
Online regisztráció: <http://www.cac2012.mke.org.hu>
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Schenker Beatrix, cac2012@mke.org.hu
A konferenciára közel 300 fő regisztrált.
A konferencia első napján, 2012. június 25-én speciális kemometriai tárgyú tanfolyamokat szervezünk. A tanfolyamok leírása (<http://www.cac2012.mke.org.hu/preconference-courses.html>) és a részvételi díjak is megtalálhatók a konferencia honlapján.
A tanfolyamokra e-mailen jelentkezhetnek: cac2012@mke.org.hu.
Természetesen kérjük megjelölni a választott tanfolyam(ka)t.

III. Terrestrial Radioisotopes in Environment International Conference on Environmental Protection

2012. május 16–18.
Pannon Egyetem, B épület, 2. emeleti Konferenciaterem
(Veszprém, Egyetem u. 10.)
REGISZTRÁCIÓ ÉS MINDEN TOVÁBBI INFORMÁCIÓ:
<http://rri.vein.hu/conferences/terrestrial/2012/index.html>

Kémiai számítások a laboratóriumban (technikusoknak)

A Veszprémi (Pannon) Egyetem Analitikai Kémia Tanszéke, a Magyar Kémikusok Egyesülete és a Science & Technology Enterprise budapesti továbbképző tanfolyama (3 nap)
2012. május 15–17. (kedd–csütörtök) 9.30–16.00
Magyar Kémikusok Egyesülete (Budapest, I. kerület, Hattyú u. 16. II/8.)
Részvételi díj: 50 000 Ft/fő + áfa (szállást és étkezést nem tartalmaz)
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: www.mke.org.hu, hírek, aktualitások rovat

Komplekxkémiai egyensúlyok alkalmazása a laboratóriumi méréseknel

A Veszprémi (Pannon) Egyetem Analitikai Kémia Tanszéke, a Magyar Kémikusok Egyesülete és a Science & Technology Enterprise továbbképző tanfolyama (4 nap)
2012. május 23–24. és 30–31. (szerda–csütörtök) 9.30–16.00
Magyar Kémikusok Egyesülete (Budapest, I. kerület, Hattyú u. 16. II/8.)
Részvételi díj: 66 000 Ft/fő + áfa (szállást és étkezést nem tartalmaz)
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: www.mke.org.hu, hírek, aktualitások rovat

Szuperkritikus Oldószerek Analitikai és Műveleti Alkalmazása Konferencia

2012. május 24. Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Jelentkezés résztvevők részére: 2012. május 15.
Jelentkezési lapot, illetve további információt a honlapunkon talál:
<http://sfe.kkft.bme.hu/SFE2012/index.htm>
Elérhetőségeink: tel.: 463-21-74, 463-3191, e-mail: simandi@mail.bme.hu

Gumiabroncs szenzor ankét

Az ankét témája: gumiabroncsba épített szenzor elektronikus csúszásgátláshoz
Szervezők: MKE Gumiipari Szakosztálya és MAGUSZ
2012. június 8. péntek, 10.00–13.00
Magyar Kémikusok Egyesülete (Budapest, I. kerület, Hattyú u. 16. II/8.)



Az MKE 2012. évi rendezvéynaptára

XIV. Országos Diákegyes Napok	2012. április 14–15.
XLIV. Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny	2012. május 11–13.
Közygűlés	2012. május 18.
Biztonságtéchnikai Konferencia	2012. május 23–25.
Surface Chemistry and Performance of Carbon Materials	2012. június 15–16.
XIII. Chemometrics in Analytical Chemistry	2012. június 25–29.
Kémiatanárok Nyári Továbbképzése	2012. augusztus 21–24.
10 th Conference on Colloid Chemistry	2012. augusztus 29–31.
6 th CEEPC	2012. október 14–17.
Őszi Radiokémiai Napok	2012. október
Kozmetikai Szimpózium	2012. november

Az MKE Intézőbizottság ülése

(2012. március)

1. Az Intézőbizottság (IB) megvitatta a Nemzetközi Kapcsolatok Bizottsága (NKB) beszámolóját a 2011-es évről. Intézőbizottsági határozatban rögzítette, hogy a nemzetközi szervezetekbe és azok különböző szakmai egységeibe kiküldött MKE-képviselő személyéről az IB dönt. Képviselő személyére vonatkozó javaslatot az NKB terjeszt elő, amely előterjesztés készítéséhez igény és célszerűség szerint veszi igénybe a szakmailag illetékes MKE szakosztály/társaság vagy szakcsoport segítségét.
2. Az IB támogatta a Szlovák Kémikusok Egyesületével történő „Együttműködési megállapodás” létrehozását, és felhatalmazta az MKE elnökét az egyeztetett és elfogadott szövegű szerződés hivatalos aláírására.
3. Az IB egyetértett azzal, hogy folytatódjon a kétoldalú együttműködési megállapodásokban európai kémikus egyesületekkel vállalt „előadócsere program”, és az esedékes MKE-meghívások mielőbb konkretizálандók.
4. Az IB folytatta az MKE Stratégia 2011–2015 dokumentum tartalmi elemeinek megvitatását, és állásfoglalásokkal segítette a szövegtervezet elkészítését.
5. Az MKL felelős szerkesztője által bemutatott módosított MKL véleménykérő kérdőívet az IB egyetértőleg tudomásul vette. A kérdőívek kiküldéséről az MKE Titkárság gondoskodik.

Kovács Attila

Kitüntetések március 15. alkalmából

Kollár László, az MTA doktora, a Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kara Kémiai Intézetének egyetemi tanára az átmenetifémek komplexeinek katalizátorokként való alkalmazása terén elért eredményeiért, gyakorlati szempontból fontos gyógyszerek előállításához szükséges királis építőelemek újszerű és gazdaságos szintéziséért, tudományszervezési, valamint eredményes oktatói, utánpótlás-nevelési tevékenységéért Széchenyi-díjban részesült. Az mta.hu munkatársának „A kémia jelenéről és jövőjéről” szólva arra hívta fel a figyelmet, hogy miközben a kutatók munkáját elismerés és valamiféle tiszteletteljes távolságtartás övezi, a természettudományos oktatás színvonala romlik. Reményét fejezte ki ugyanakkor,

hogy egyre szélesebb körben ismerik fel az oktatás fontosságát, és a tudás elfogadott értékmerővé válik.

Párkányi László, az MTA doktora, professor emeritus, az MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet tudományos tanácsadója, a Magyar Érdemrend tisztikeresztje kitüntetését vehette át az anyagtudományok, különösen a szerkezeti kémia és a röntgenkristallográfia területén végzett több mint négy évtizedes kimagasló tevékenységéért.

Zemplén Győzőné Papp Éva, az MTA Titkárság nyugalmazott osztályvezetője, a Kémiai Tudományok Osztálya volt tudományos titkára a kémiai tudományok területén elért eredményes tudományos munkájáért, az MTA Titkárság osztályvezetőjeként végzett kiemelkedő tudományszervezői tevékenységéért a Magyar Ezüst Érdemkeresztet vehette át. „Jóleső érzéssel tölt el, hogy voltak, akik kitüntetésre érdemesnek tartottak. Köszönöm” – mondta kitüntetésé átvételekor.

Olvasóink nevében gratulálunk a kitüntetetteknek, és további sikereket, jó egészséget kívánunk!

K. T.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL LXVII. No. 5. May 2012

CONTENTS

<i>Macromolecular architecture with functional polymers</i>	138
BÉLA IVÁN, CSABA FODOR, MÁRTON HARASZTI, GERGELY KALI, GYÖRGY KASZA, PÉTER MEZEY, ZSÓFIA OSVÁTH, VIKTÓRIA PÁLFI, SZABOLCS PÁSZTOR, AMÁLIA SOLTÉSZ, ÁKOS SZABÓ, SÁNDOR SZABÓ, ISTVÁN SZANKA, GYÖRGYI SZARKA, KLÁRA VEREBÉLYI	
<i>Original and generic chemical research at Egis</i>	140
BALÁZS VOLK	
<i>Organocatalysis in continuous flow reactors</i>	143
SÁNDOR ÖTVÖS, ISTVÁN MÁNDITY, FERENC FÜLÖP	
Bruckner Room Lecture	
<i>Synthesis and single-crystal X-ray structure of gold(I) supramolecules</i>	146
ANDREA DEÁK	
<i>Chemical communications, 2011</i>	147
GÁBOR NÁRAY-SZABÓ	
<i>How high does the flag of science fly?</i>	150
GYÖRGY SZÉKELY	
<i>Bookreview</i>	152
EUCHEMS NEWSLETTER, MAY 2012	153
<i>A rare anniversary: Kálmán Sasvári is 100!</i>	157
ALAJOS KÁLMÁN	
<i>Chemistry is not history. Part I.</i>	160
ÁRPÁD KUCSMAN, ISTVÁN JALSOVSZKY	
<i>Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)</i>	164
<i>The Hungarian Marie Curie. Life and work of Ilona Kelp</i>	166
ESZTER DOROTTYA ÚJ	
<i>Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)</i>	168
<i>News of the Month</i>	170

sicc

Desiccators and Drying Cabinets



AKTIVIT Kft.

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.

Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.

Levél: 1581 Budapest 146, PF.: 104.

Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu

Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök



Univerzális hatásos exszikkátorok és tároló boxok minden feladatra



PRAKTIKUS - HATÁSOS - CÉLSZERŰ